

# KnowItAll ソフトウェアのトレーニング

---

## 検索

# 検索

## 基本的なスペクトル検索の方法

### 目的

これらの演習では、**KnowItAll** を使用してスペクトル検索を実行する方法を示します。

### 目標

これらのエクササイズを通じて、以下の内容を学ぶことができます：

- 検索するデータベースの選択方法
- さまざまなスペクトル検索の設定と実行方法

### 背景

参照データベースに対するスペクトル検索は、未知の化合物の解析や化合物の検証に頻繁に利用されます。**KnowItAll SearchIt** アプリケーションは、この目的をサポートするためのツールです。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples フォルダ内です

- Acetic anhydride.dx
- Multi-Technique Sadtler Demo Database - Wiley [DEMO].sdbx

#### **KnowItAll** 使用アプリケーション

- SearchIt™
- Minelt™

## KnowItAll の IR および Raman スペクトル検索アルゴリズム

KnowItAll が使用するアルゴリズムについての背景知識は役立つでしょう。IR および Raman スペクトルの比較において、KnowItAll は以下のアルゴリズムを使用しています：

### 相関

これは KnowItAll の検索でデフォルトのアルゴリズムとして採用されており、業界標準の相関アルゴリズムに準拠しています。相関アルゴリズムは、ユークリッド距離アルゴリズムと似ていますが、比較の前に各スペクトルが平均中心化されます。その後、ドット積の正規化が行われます。この手法は、ノイズのあるスペクトルやベースラインの問題を持つスペクトルに対して、特にベースラインオフセットが負のスパイクや化学的ノイズによる場合に、検索結果を改善することができます。ただし、ユークリッド距離アルゴリズムよりもわずかに時間がかかります。検索速度が遅くなるのは、データベース内の各スペクトルが比較前に平均中心化および正規化されるためです。相関アルゴリズムによって得られる検索結果は、未知の化合物がデータベースに存在しなくても、未知の化合物とスペクトル的に類似しています。相関アルゴリズムは、ピークの面積に大きく影響を受けます。広がった特徴は鋭い特徴よりも強く重み付けされます。このアルゴリズムは、ピークのシフトや相対的なバンドの強度の非線形性に対して最も寛容です。

### 相関 (クラシック)

KnowItAll 2020 以前のすべてのバージョンに存在した相関アルゴリズムは、ユークリッド距離アルゴリズムに類似していましたが、業界標準の相関アルゴリズムには準拠していませんでした。KnowItAll 2020 からは、相関アルゴリズムは業界標準に準拠し、KnowItAll での検索のデフォルトアルゴリズムとなっています。過去の検索結果を再現したいお客様のために、以前の相関アルゴリズムは「クラシックな相関」として提供されています。

### ユークリッド距離：

ユークリッド距離アルゴリズムは、2 つのスペクトル間の点ごとの差を測定します。ユークリッド距離アルゴリズムによって得られる結果は、未知の化合物がデータベースに存在しない場合でも、スペクトル的に類似しています。ただし、このアルゴリズムは、未知のスペクトルが傾斜したベースラインやオフセットを持つ場合には、検索結果が劣化する可能性があります。ユークリッド距離アルゴリズムは、ピークの面積に大きく影響されます。広がった特徴は鋭い特徴よりも強く重み付けされます。また、このアルゴリズムは、ピークのシフトや相対的なバンドの強度の非線形性に対して最も寛容です。

### 一次導関数ユークリッド距離

このアルゴリズムは、未知のスペクトルにおけるベースラインの傾斜やオフセットの影響を軽減するために使用されます。ユークリッド距離アルゴリズムと比べて、一次導関数ユークリッド距離はやや検索速度が遅くなりますが、特に未知のスペクトルが 2 つ以上の化合物の混合物である場合、より良い検索結果が得られることがあります。一次導関数ユークリッド距離アルゴリズムは、傾斜の変化によって重要な影響を受けます。鋭い特徴は広がった特徴よりも強く重み付けされます。また、このアルゴリズムはピークのシフトに非常に敏感です。わずかなシフトでも、アルゴリズムが類似した結果を見逃す可能性があります。

**二次導関数ユークリッド距離：**二次導関数ユークリッド距離アルゴリズムを使用して、参照スペクトルとクエリスペクトルの二次導関数を比較します。

## 最適化された補正：スペクトル検索のための画期的な技術

スペクトル検索は、研究者が材料を分類または同定するために最も重要なツールの一つですが、依然としてエラーや不完全さに悩まされています。スペクトル検索では、サンプルスペクトルを参照スペクトルのデータベースと比較します。適な一致をデータベース内で見つけるために、スペクトルは最適化された補正が行われます。これにより、計測器やアクセサリ、環境条件などの要因によって生じるスペクトル間の差異を補正することができます。


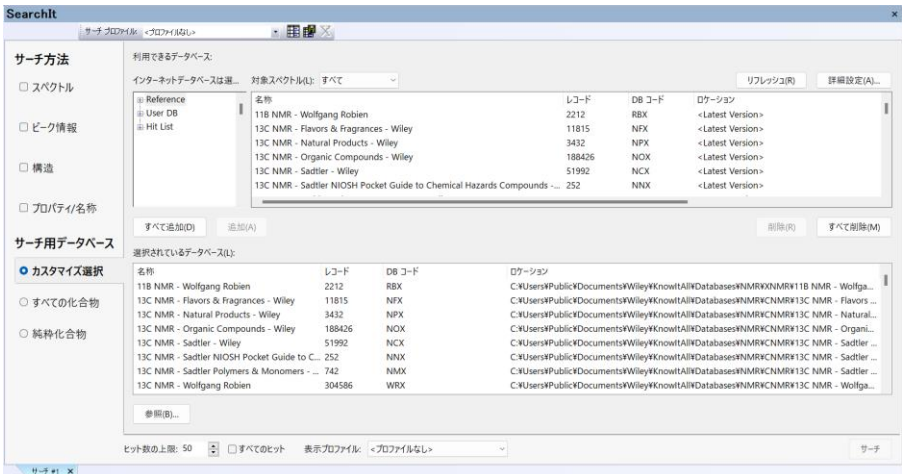
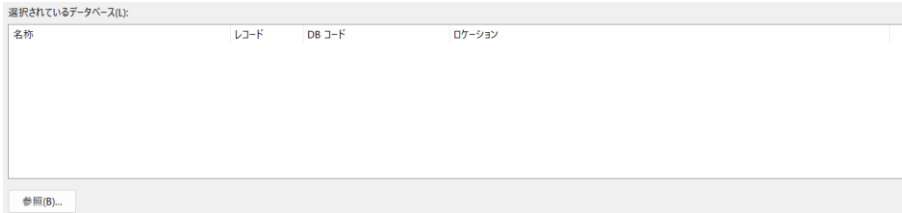
ASTM のスペクトル検索 1 に関するガイドによれば、同じ化合物の比較される 2 つのスペクトルがさまざまな理由で異なる場合、適切な一致スコアを得るためには、さまざまなアルゴリズムや手動での調整方法が存在すると述べられています。これらの方法は特定のケースでは機能するかもしれませんが、X 軸のシフトなど微妙な不一致は手動では非常に難しく、特定のスペクトルの誤りに対して柔軟に対応することはできません。一般的に使用される数学的なアルゴリズムは、欠陥のあるスペクトルにおけるこの種のエラーを補正することができません。

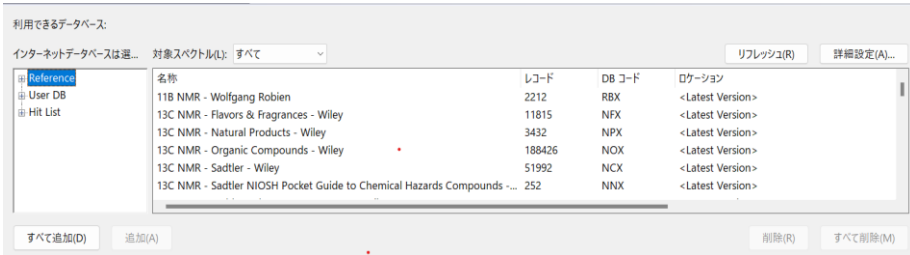

分光学の経験が浅い人々は、専門の分光学者が行うような手動の補正は行いにくいものです。彼らは自分のサンプルスペクトルに必要な補正をどのように行えば最適な検索結果が得られるのかを知ることができません。この懸念に対処するため、Wiley は特許取得済みの画期的な技術である最適化された補正 (**Optimized Corrections**) を導入しました。この技術は、クエリと各個別の参照スペクトルの間で最適な一致を見つけるために、複数の補正を計算上行います。この補正は、クエリと参照スペクトルの両方に対して行われます。このトレーニングガイドでは、最適化された補正技術が、単独の剛性な検索アルゴリズムや手動の方法に比べて、クエリと参照スペクトルの間でより優れた一致を実現することを実証します。また、スペクトルを検索に最適化するために、従来の手法と比べてどのように効果的な結果をもたらすかも示します。


最適化された補正では、選択した範囲内での検索時にフルスペクトルを考慮します。

<sup>1</sup> E2310-04 - 中赤外分光法で記録されたデータを用いたスペクトル検索におけるカーブマッチングアルゴリズムの使用ガイド (2009 年版)。ASTM インターナショナルウェブサイト。 <http://www.astm.org/Standards/E2310.htm> (2015 年 3 月 4 日アクセス)。

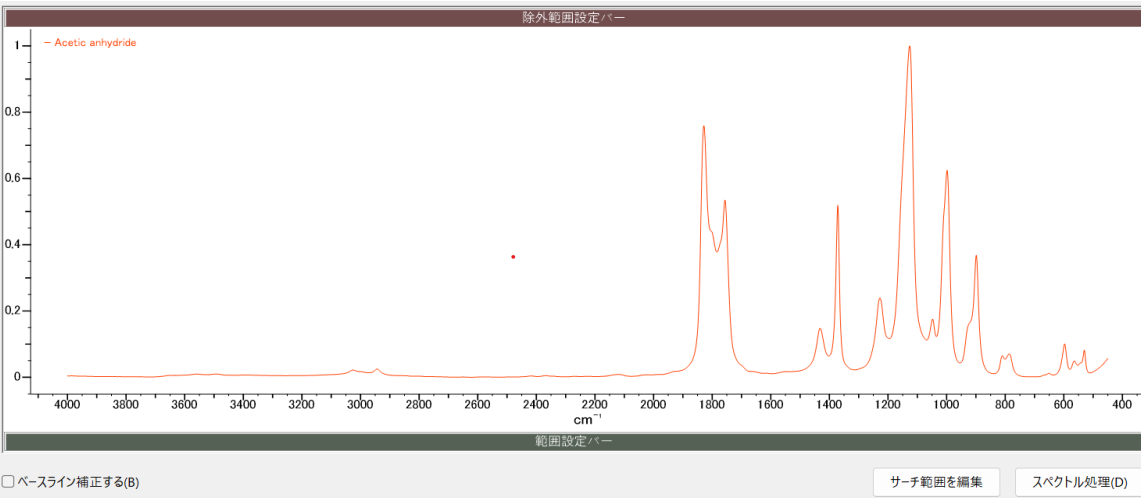
新しい検索を作成し、参照データベースを選択

	アクション	結果																																																																
1	<p>以下の手順を実行してください：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが開いていない場合は、データツールボックスに移動し、そのアイコンをクリックします。</li> </ul>  <p>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが既に開いている場合は、現在の検索を終了するために、右上の閉じるボタンをクリックします。</p>	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションが表示され、前回使用したデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」ウィンドウに表示されます：</p>  <p>The screenshot shows the SearchIt interface with the following data tables:</p> <p><b>利用できるデータベース:</b></p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Natural Products - Wiley</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Organic Compounds - Wiley</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table> <p><b>選択されているデータベース:</b></p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\11B NMR - Wolfga...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Flavors ...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Natural Products - Wiley</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Natura...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Organic Compounds - Wiley</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Organi...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to C. 252</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler Polymers &amp; Monomers - ...</td> <td>742</td> <td>NMX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Wolfgang Robien</td> <td>304586</td> <td>WRX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Wolfga...</td> </tr> </tbody> </table>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	<Latest Version>	13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>	13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...	252	NNX	<Latest Version>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\11B NMR - Wolfga...	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Flavors ...	13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Natura...	13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Organi...	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...	13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to C. 252	252	NNX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...	13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers - ...	742	NMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...	13C NMR - Wolfgang Robien	304586	WRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Wolfga...
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																															
11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>																																																															
13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	<Latest Version>																																																															
13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>																																																															
13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	<Latest Version>																																																															
13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>																																																															
13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...	252	NNX	<Latest Version>																																																															
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																															
11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\11B NMR - Wolfga...																																																															
13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Flavors ...																																																															
13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Natura...																																																															
13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Organi...																																																															
13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...																																																															
13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to C. 252	252	NNX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...																																																															
13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers - ...	742	NMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...																																																															
13C NMR - Wolfgang Robien	304586	WRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Wolfga...																																																															
2	<p><b>Search Databases</b> の下にある「<b>User-Select</b>」をクリックします。</p>	<p>このオプションでは、検索に使用するデータベースを選択することができます。また、ユーザーが作成したデータベースも検索に含めることができます。</p>																																																																
3	<p>もし「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」ペインに既にデータベースの一覧が表示されている場合は、「<b>すべて削除</b>」をクリックしてリストをクリアします。</p>	<p><b>ユーザーカテゴリー</b>は以下のように表示されています：</p>  <p>The screenshot shows the 'Selected for Searching' window with the following data table:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td> </td> <td> </td> <td> </td> <td> </td> </tr> </tbody> </table>	名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																												
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																															

4	<p>「<b>Available for Searching</b> (検索可能)」ウィンドウの左側には、ツリー構造があり、各ブランチを展開することで特定のデータベースカテゴリー (<b>Reference (参照)</b>、<b>User (ユーザー)</b>、<b>Hit List (ヒットリスト)</b>) が表示されます。ネットワーク、ローカル、またはすべてのデータベースが表示されるように指定することもできます。利用可能なデータベースはウィンドウの右側に表示されます。</p>	<p><b>Reference (参照)</b> カテゴリーは以下のように表示されています。各データベースには、データベースの<b>名前</b>、<b>レコード数</b>、<b>場所</b>、および<b>バージョン</b>が表示されます。</p>  <p><b>注記:</b> オンラインで利用可能なデータベースにアクセスできるかどうかによって、表示が異なる場合があります。右上の「<b>詳細 (Advanced)</b>」をクリックして、「<b>詳細オプション</b>」ダイアログボックスを開きます。ここで、オンラインデータベースへのアクセス方法やローカルデータベースの場所を追加・削除することができます。設定を変更した後は、表示を更新するために「<b>更新 (Refresh)</b>」をクリックしてください。</p>
5	<p>左下の「<b>閲覧で選択</b>」ボタンをクリックします。</p>	<p>「<b>データベースまたはヒットリストの閲覧</b>」ダイアログボックスが開きます。</p>
6	<p>「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples」に移動してください。</p> <p>「<b>Multi-Technique Sadtler Demo Database - Wiley (DEMO).sdbx</b>」を開いてください。</p>	<p>データベースが「<b>検索対象として選択された</b>」リストに表示されます。</p> 

7	<p>必要に応じて、「全てのヒット」のチェックボックスを外し、「ヒットリストのサイズ制限」を 50 に設定してください。</p> <p><b>注記：</b>2 つ以上のデータベースを使用してスペクトル検索やピーク検索を行う際には、ヒット数を制限する方が良いです。「全てのヒット」にチェックを入れたり、大きな値を使用すると、検索速度が著しく低下する可能性があります。</p>	<p>ヒットリストのサイズ制限は 50 に設定されています：</p> <p>ヒット数の上限: 50  <input type="checkbox"/> すべてのヒット</p>
---	--	--

## スペクトルファイルを開きます

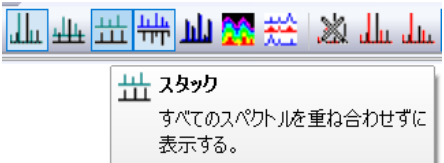
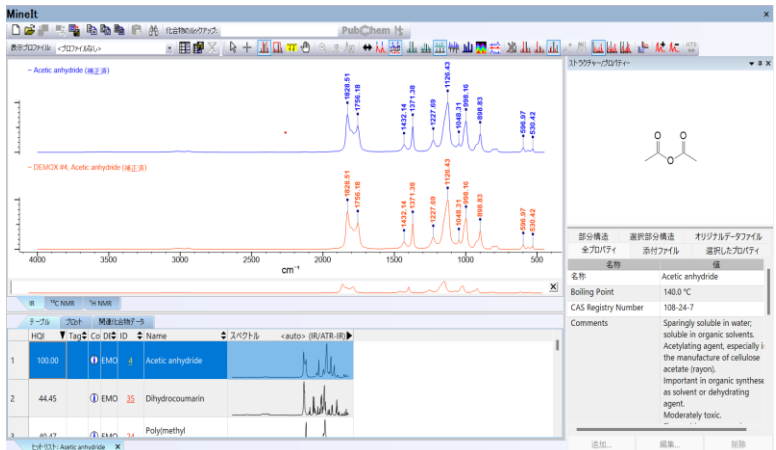
	アクション	結果
1	<p>検索カテゴリの下にある「スペクトル」ボタンをクリックします。</p> <p>「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR」に移動します。</p> <p>「Acetic anhydride.jdx」を選択します。</p> <p>「Open」をクリックします。</p> <p>注記：「ファイルの種類」フィルターを使用して、表示を特定のファイルタイプ（JCAMP (*.dx, *.jdx)など）に制限するか、すべてのファイル (*.*) を表示するかを選択することもできます。</p>	<p>すると、[開く]ダイアログボックスが表示されます。スペクトルは IR スペクトルとして認識され、スペクトルタブのスペクトルペインに表示されます：</p>  <p>注記：希望があれば、下部のチェックボックスを使ってクエリースペクトルにベースライン補正を適用することができます。ただし、KnowItAll は自動的にベースラインを補正しますので、その必要はありません。</p>

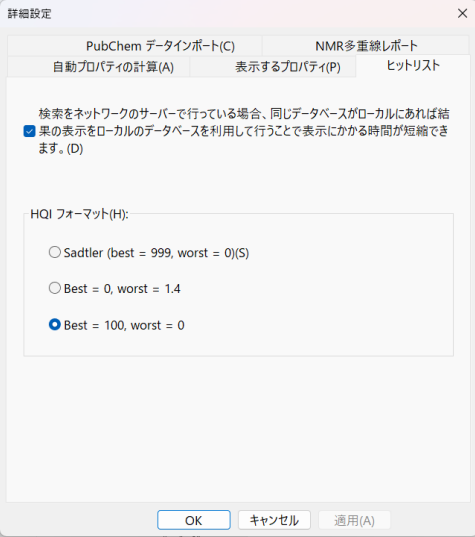


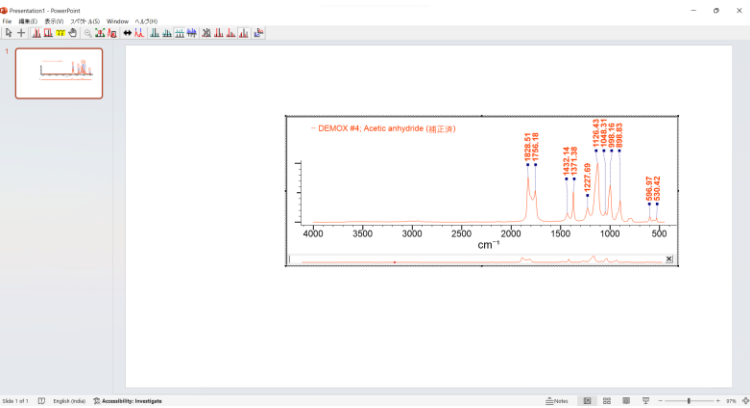
## 検索を行う前に微調整

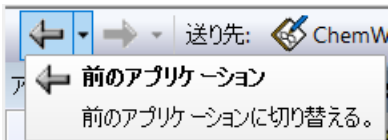
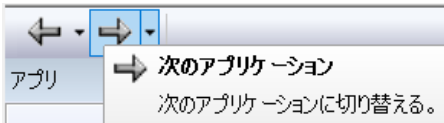
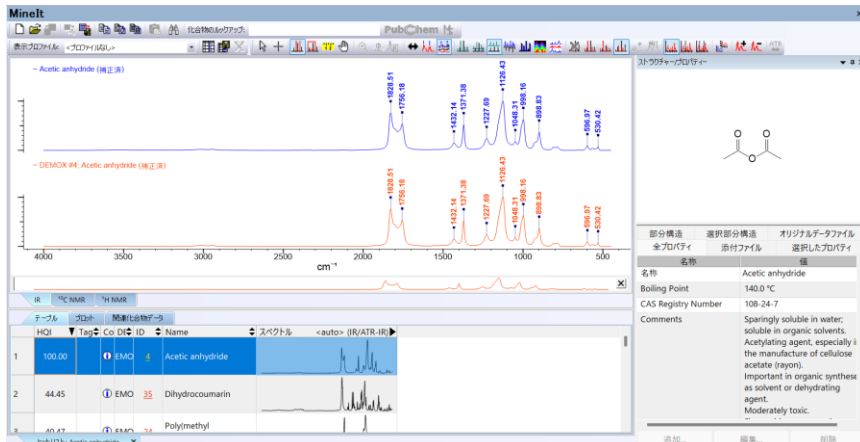
	アクション	結果
1	<p>「<b>手でマスク範囲を編集</b>」をクリックしてください。</p> <p><b>注記：</b>「<b>スペクトルの含有/除外マスク</b>」ウィンドウを閉じた後に、スペクトルペインの除外範囲バーと含有範囲バーをクリックしてドラッグすることもできます。</p>	<p>「<b>スペクトルの含有/除外マスク</b>」ウィンドウが開きます：</p> 
2	<p>「<b>スペクトルの除外マスク</b>」のリストの下にある「<b>全範囲を使用する</b>」のチェックボックスを外してください。いくつか選択してその効果を確認することもできます。</p> <p><b>注記：</b>これらのマスクの使用方法は、後のレッスンで詳しく説明されます：</p>	<p>予め定義されている除外マスクのリストが利用できるようになります：</p> 

アクション	結果
<p>3 「スペクトルの除外マスク」のリストの下にある「全範囲を使用する」のチェックボックスを再度選択してください。</p>	<p>選択したスペクトルの除外マスクはスペクトルから取り除かれます：</p> 
<p>4 「OK」をクリックして「スペクトルの含有/除外マスク」ウィンドウを閉じてください。</p>	<p>「スペクトルの含有/除外マスク」ウィンドウが閉じられます。</p>
<p>5 スペクトルペインの右下にある「スペクトルの編集」をクリックしてください。</p>	<p>すると、スペクトルは「ProcessIt」アプリケーションに表示され、検索に関する問題を修正したり、修正されたスペクトルを「SearchIt」のスペクトルペインに保存することができます。</p> 

	アクション	結果
6	「キャンセル」をクリックします。	すると、スペクトルは「SearchIt」アプリケーションに戻ります。なお、「ProcessIt」で行った変更は保存されません。
7	<p>「検索」をクリックします。その後、「Minelt」で「スタックスペクトラビュー」を選択します：</p> 	<p>すると、検索結果が「Minelt」アプリケーションに自動的に表示され、HQI でソートされたヒットリストとして表示されます。未知のスペクトルと選択したデータベースのスペクトルが表示されます。</p>  <p><b>HQI</b> (Hit Quality Index) は、参照スペクトルとクエリスペクトルの類似度を示す値です。<b>HQI</b> のデフォルトのスケールは 0 から 100 です。</p>

	アクション	結果
8	<p>注記：各検索結果には、<b>HQI</b>が表示されます。HQIの設定は「ファイル」&gt;「環境設定」&gt;「ヒットリスト」の項目にあります。ダイアログを閉じるには「キャンセル」をクリックしてください。</p>	<p>「詳細設定」ダイアログが開かれます：</p> 
9	ヒント	<ul style="list-style-type: none"><li>ヒットリストの各結果には、「受け入れる」、「仮承認」、「拒否」のいずれかのタグを付けることができます。タグは「ヒットリスト」&gt;「タグ付け」オプションを選択するか、<b>タグ列</b>をダブルクリックすることで設定できます。タグを付けることで、ヒットリストをタグに基づいてソートすることも可能です。</li><li>ヒットリストで表示される列を編集するには、左下のデータテーブルを右クリックし、「<b>列の編集...</b>」オプションを選択します。そこで、表示したい列や表示順を選択することができます。</li></ul>

アクション	結果
<p>10 「編集」メニューから「アクティブスペクトルのコピー」を選択し、MS Office のツール（例：PowerPoint）を開いてください。画面上で右クリックし、「貼り付け」を選択します。</p>	<p>KnowItAll のオブジェクト（スペクトルペインなど）は、MS ツールにコピーして埋め込むことができます。</p> 
<p>11 PowerPoint でオブジェクトをダブルクリックします。</p>	<p>すると、KnowItAll スペクトル操作ツールバーが表示されます。たとえば、ピークのラベリングをオンにすることができます。</p> 

	アクション	結果
<p>12 KnowItAll では、画面上部の「ファイル」メニューの下にある「戻る」ボタンをクリックします。</p> 	<p>そうすると、メインの SearchIt ウィンドウにサマリータブが追加された SearchIt アプリケーションに戻ります：</p> 	
<p>13 そこから、「KnowItAllNext アプリケーション」ボタンをクリックします。</p> 	<p>これにより、再度 Minelt に戻り、ヒットリストが表示されます。</p> 	

# 検索

## 検索プロファイルの作成方法と、Minelt プロファイルを使用して検索結果を表示する方法

### 目的

この演習では、検索プロファイルの使用方法和、Minelt プロファイルを使用して検索結果を表示する方法を説明します。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- 検索プロファイルの適用方法
- 検索プロファイルの作成方法

### 背景

検索プロファイルは、データベースやヒットリストのサイズ制限など、検索パラメータの事前定義された組み合わせです。これらは後で再利用するために保存することができます。検索プロファイルを使用することで、同じ種類の検索を繰り返す場合に、検索作業が容易になります。

Minelt プロファイルは、Minelt で定義されるヒットリストの情報表示の設定です。このプロファイルは、検索に関連付けて使用することができます。



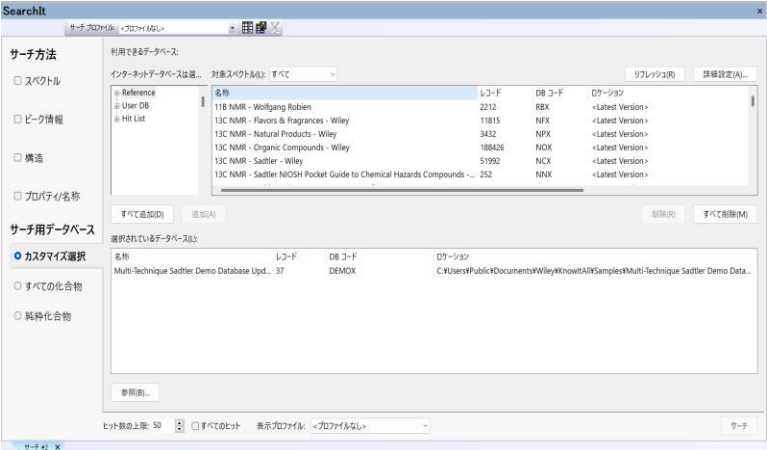

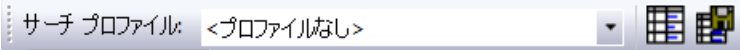
このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

#### KnowItAll 使用アプリケーション

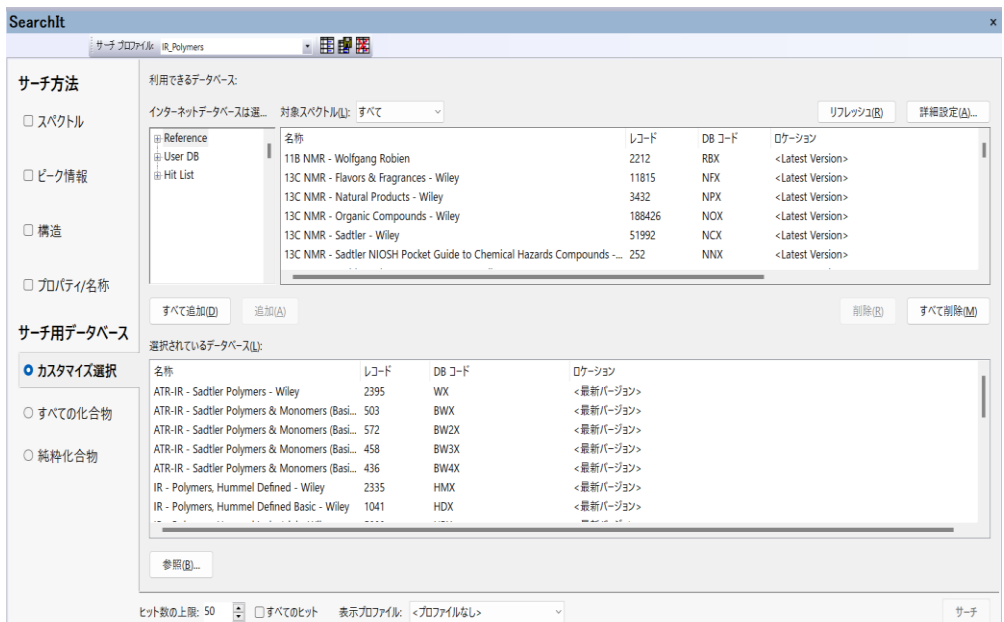
- SearchIt™

### 事前に定義された検索プロファイルを適用

アクション	結果
-------	----

	アクション	結果
1	<p>以下の手順を実行してください：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが開いていない場合は、データツールボックスに移動し、そのアイコンをクリックします。</li> </ul>  <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが既に開いている場合は、現在の検索を終了するために「<b>SearchIt Close</b> (SearchIt の終了)」ボタンをクリックしてください。</li> </ul>	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションの「<b>ユーザー選択</b>」タブが表示され、最後に使用したデータベースが「<b>Selected for Searching</b> (検索対象として選択された)」リストに表示されます：</p> 
2	<p>もし既に検索のためにデータベースが選択されている場合は、「<b>すべて削除</b>」をクリックして選択をクリアします。または、個々のエントリをダブルクリックしてリストから削除することもできます。</p>	<p>「<b>Selected for Searching</b> (検索対象として選択された)」のデータベースセクションがクリアされます：</p> 
3	<p>必要な場合は、「表示」&gt;「<b>プロファイルツールバー</b>」を選択して、検索プロファイルツールバーを表示します。</p>	




アクション	結果																																																																																								
<p>4 検索プロファイルのドロップダウンメニューから「IR_ポリマー」プロファイルを選択します。</p>	<p>ポリマーデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに表示されます：</p>  <p>The screenshot shows the SearchIt window with the following data:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>利用できるデータベース:</th> <th>インターネットデータベースは選...</th> <th>対象スペクトル(L):</th> <th>すべて</th> <th>リフレッシュ(B)</th> <th>詳細設定(A)...</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Reference</td> <td>名称</td> <td>レコード</td> <td>DB コード</td> <td>ロケーション</td> <td></td> </tr> <tr> <td>User DB</td> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Hit List</td> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Natural Products - Wiley</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Organic Compounds - Wiley</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <table border="1"> <thead> <tr> <th>選択されているデータベース(L):</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>カスタマイズ選択</td> <td>ATR-IR - Sadtler Polymers - Wiley</td> <td>2395</td> <td>WX</td> <td>&lt;最新バージョン&gt;</td> </tr> <tr> <td>すべての化合物</td> <td>ATR-IR - Sadtler Polymers &amp; Monomers (Basi...</td> <td>503</td> <td>BWX</td> <td>&lt;最新バージョン&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Polymers &amp; Monomers (Basi...</td> <td>572</td> <td>BW2X</td> <td>&lt;最新バージョン&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Polymers &amp; Monomers (Basi...</td> <td>458</td> <td>BW3X</td> <td>&lt;最新バージョン&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Polymers &amp; Monomers (Basi...</td> <td>436</td> <td>BW4X</td> <td>&lt;最新バージョン&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>IR - Polymers, Hummel Defined - Wiley</td> <td>2335</td> <td>HMX</td> <td>&lt;最新バージョン&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>IR - Polymers, Hummel Defined Basic - Wiley</td> <td>1041</td> <td>HDX</td> <td>&lt;最新バージョン&gt;</td> </tr> </tbody> </table>	利用できるデータベース:	インターネットデータベースは選...	対象スペクトル(L):	すべて	リフレッシュ(B)	詳細設定(A)...	Reference	名称	レコード	DB コード	ロケーション		User DB	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>		Hit List	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	<Latest Version>			13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>			13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	<Latest Version>			13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>			13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...	252	NNX	<Latest Version>		選択されているデータベース(L):	名称	レコード	DB コード	ロケーション	カスタマイズ選択	ATR-IR - Sadtler Polymers - Wiley	2395	WX	<最新バージョン>	すべての化合物	ATR-IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basi...	503	BWX	<最新バージョン>		ATR-IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basi...	572	BW2X	<最新バージョン>		ATR-IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basi...	458	BW3X	<最新バージョン>		ATR-IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basi...	436	BW4X	<最新バージョン>		IR - Polymers, Hummel Defined - Wiley	2335	HMX	<最新バージョン>		IR - Polymers, Hummel Defined Basic - Wiley	1041	HDX	<最新バージョン>
利用できるデータベース:	インターネットデータベースは選...	対象スペクトル(L):	すべて	リフレッシュ(B)	詳細設定(A)...																																																																																				
Reference	名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																																																					
User DB	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>																																																																																					
Hit List	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	<Latest Version>																																																																																					
	13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>																																																																																					
	13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	<Latest Version>																																																																																					
	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>																																																																																					
	13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...	252	NNX	<Latest Version>																																																																																					
選択されているデータベース(L):	名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																																																					
カスタマイズ選択	ATR-IR - Sadtler Polymers - Wiley	2395	WX	<最新バージョン>																																																																																					
すべての化合物	ATR-IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basi...	503	BWX	<最新バージョン>																																																																																					
	ATR-IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basi...	572	BW2X	<最新バージョン>																																																																																					
	ATR-IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basi...	458	BW3X	<最新バージョン>																																																																																					
	ATR-IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basi...	436	BW4X	<最新バージョン>																																																																																					
	IR - Polymers, Hummel Defined - Wiley	2335	HMX	<最新バージョン>																																																																																					
	IR - Polymers, Hummel Defined Basic - Wiley	1041	HDX	<最新バージョン>																																																																																					

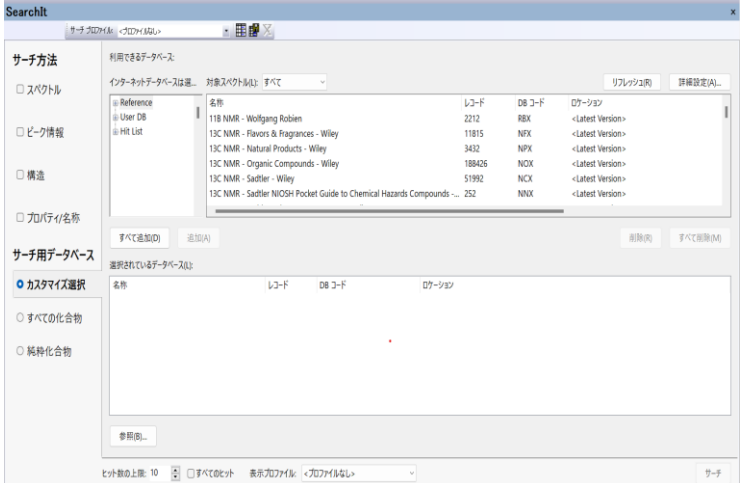
## 新しい検索プロファイルを作成

	アクション	結果
1	<p>「SearchIt Close (SearchIt の終了)」ボタンをクリックし、現在の検索を終了します。その後、「すべて削除」をクリックして、「Selected for Searching (検索対象として選択された)」リストの内容をクリアします。</p>	<p>「ユーザー選択」タブが表示されます。現在の「Selected for Searching (検索対象として選択された)」リストは空です：</p> 
2	<p>プロフィールツールバーの「新しいプロフィールを追加」ボタンをクリックします。</p>	<p>「新しいプロフィール」ダイアログボックスが表示されます。</p> 
3	<p>新しいプロフィールの名前 [IR_Polymers_2]を入力します。</p> <p>OK をクリックします。</p>	<p>「検索プロフィール」テキストボックスに新しいプロフィール名が表示されます。</p> 
4	<p>「Limit to spectral technique (スペクトル技術に制限)」のドロップダウンリストで「IR」を選択します。</p>	<p>「検索可能」リストには、IR スペクトルを持つデータベースのみが表示されます。なお、「Multi-Technique Sadtler Demo Database – Wiley (マルチテクニック サドラー デモ データベース - ワイリー)」は IR スペクトルを含んでいるため、リストに含まれています。</p>

	アクション	結果												
5	<p>「検索可能」リストから、<b>IR - Sadtler Polymers, Hummel - Wiley (IR - サドラー ポリマーズ、ハンメル - ワイリー)</b> (DB コード HUX) をクリックして選択します。「Add」をクリックします。</p>	<p>HUX データベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに追加されます：</p> <div data-bbox="701 363 1730 639" style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> <p>選択されているデータベース(L):</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>IR - Sadtler Polymers, Hummel - Wiley</td> <td>1907</td> <td>HUX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers, Humm...</td> </tr> </tbody> </table> <p>参照(B)...</p> </div>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	IR - Sadtler Polymers, Hummel - Wiley	1907	HUX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers, Humm...				
名称	レコード	DB コード	ロケーション											
IR - Sadtler Polymers, Hummel - Wiley	1907	HUX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers, Humm...											
6	<p>「検索可能」リストで、「<b>IR -- Sadtler Polymers &amp; Monomers (Basic) 1 -- Wiley (IR - サドラー ポリマー&amp;モノマー (ベーシック) 1 - ワイリー)</b>」 (DB コード BPX) をダブルクリックします。</p>	<p>BPX データベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに追加されます：</p> <div data-bbox="701 691 1814 951" style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> <p>選択されているデータベース(L):</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>IR - Sadtler Polymers &amp; Monomers (Basic) 1 ...</td> <td>1488</td> <td>BPX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers &amp; Mono...</td> </tr> <tr> <td>IR - Sadtler Polymers, Hummel - Wiley</td> <td>1907</td> <td>HUX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers, Humm...</td> </tr> </tbody> </table> <p>参照(B)...</p> </div>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basic) 1 ...	1488	BPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers & Mono...	IR - Sadtler Polymers, Hummel - Wiley	1907	HUX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers, Humm...
名称	レコード	DB コード	ロケーション											
IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basic) 1 ...	1488	BPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers & Mono...											
IR - Sadtler Polymers, Hummel - Wiley	1907	HUX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers, Humm...											

	アクション	結果
--	-------	----

	アクション	結果																																
7	<p>続けて、BMX、CRX、DAX、FRX、NEX のデータベースを追加します。</p>	<p>選択したデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」ウィンドウに追加されます：</p> <div data-bbox="982 391 1906 591" style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> <p>選択されているデータベース(L):</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>IR - Sadtler Electric Power Plant Materials - ...</td> <td>1074</td> <td>NEX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Electric Power Pla...</td> </tr> <tr> <td>IR - Sadtler Epoxy Resins, Curing Agents &amp; A...</td> <td>694</td> <td>CRX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Epoxy Resins, Curi...</td> </tr> <tr> <td>IR - Sadtler Flame Retardants - Wiley</td> <td>598</td> <td>FRX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Flame Retardants ...</td> </tr> <tr> <td>IR - Sadtler Polymers &amp; Monomers (Basic) 1 ...</td> <td>1488</td> <td>BPX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers &amp; Mono...</td> </tr> <tr> <td>IR - Sadtler Polymers &amp; Monomers (Basic) 2 ...</td> <td>850</td> <td>BMX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers &amp; Mono...</td> </tr> <tr> <td>IR - Sadtler Polymers &amp; Monomers (Compre...</td> <td>11270</td> <td>DAX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers &amp; Mono...</td> </tr> <tr> <td>IR - Sadtler Polymers, Hummel - Wiley</td> <td>1907</td> <td>HUX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers, Humm...</td> </tr> </tbody> </table> <p>参照(国)...</p> </div>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	IR - Sadtler Electric Power Plant Materials - ...	1074	NEX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Electric Power Pla...	IR - Sadtler Epoxy Resins, Curing Agents & A...	694	CRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Epoxy Resins, Curi...	IR - Sadtler Flame Retardants - Wiley	598	FRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Flame Retardants ...	IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basic) 1 ...	1488	BPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers & Mono...	IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basic) 2 ...	850	BMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers & Mono...	IR - Sadtler Polymers & Monomers (Compre...	11270	DAX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers & Mono...	IR - Sadtler Polymers, Hummel - Wiley	1907	HUX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers, Humm...
名称	レコード	DB コード	ロケーション																															
IR - Sadtler Electric Power Plant Materials - ...	1074	NEX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Electric Power Pla...																															
IR - Sadtler Epoxy Resins, Curing Agents & A...	694	CRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Epoxy Resins, Curi...																															
IR - Sadtler Flame Retardants - Wiley	598	FRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Flame Retardants ...																															
IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basic) 1 ...	1488	BPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers & Mono...																															
IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basic) 2 ...	850	BMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers & Mono...																															
IR - Sadtler Polymers & Monomers (Compre...	11270	DAX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers & Mono...																															
IR - Sadtler Polymers, Hummel - Wiley	1907	HUX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers, Humm...																															
8	<p>「<b>ユーザー選択</b>」タブで、ヒットリストのサイズ制限を 10 に変更します。</p>	<p>ヒット数の上限: 10 <input type="text" value="10"/> <input type="checkbox"/> すべてのヒット</p>																																
9	<p>プロファイルツールバーの「<b>現在のプロファイルを保存</b>」ボタン  をクリックします。メッセージボックスが表示され、現在のプロファイルを上書き保存するかどうかを尋ねられます。新しいプロファイルを保存するには、「はい」をクリックします。</p>																																	

	アクション	結果																																											
10	<p>「X」をクリックして現在の検索を終了し、新しく作成した「IR_ポリマー_2」検索プロファイルを選択します。</p>	<p>このプロファイルに関連するデータベースと検索設定が表示されます：</p>  <p>The screenshot shows the SearchIt application window with the following sections:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>SearchIt</b> window title and search bar.</li> <li><b>Search Method (サーチ方法)</b> section: <ul style="list-style-type: none"> <li>Internet Databases (インターネットデータベース) list: <table border="1"> <thead> <tr> <th>Reference</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>バージョン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>User DB</td> <td>118 NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>HR List</td> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Natural Products - Wiley</td> <td>3432</td> <td>NPK</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Organic Compounds - Wiley</td> <td>188426</td> <td>NCK</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCK</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table> </li> </ul> </li> <li><b>Search Databases (サーチ用データベース)</b> section: <ul style="list-style-type: none"> <li>Selected Databases (選択されているデータベース): <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>バージョン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> </li> </ul> </li> </ul>	Reference	名称	レコード	DB コード	バージョン	User DB	118 NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>	HR List	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	<Latest Version>		13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPK	<Latest Version>		13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NCK	<Latest Version>		13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCK	<Latest Version>		13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...	252	NNX	<Latest Version>	名称	レコード	DB コード	バージョン				
Reference	名称	レコード	DB コード	バージョン																																									
User DB	118 NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>																																									
HR List	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	<Latest Version>																																									
	13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPK	<Latest Version>																																									
	13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NCK	<Latest Version>																																									
	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCK	<Latest Version>																																									
	13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...	252	NNX	<Latest Version>																																									
名称	レコード	DB コード	バージョン																																										

## 「Minelt」プロファイルを使用して、ヒットリストの表示方法を指定

KnowItAll 2024 の新機能として、SearchIt で検索ヒットリストの表示方法を簡単に指定できるようになりました。ハイライトされたドロップリストを展開するだけで設定できます：

The screenshot shows the SearchIt application window with the following components:

- Search Method (サーチ方法):** Includes checkboxes for Spectral (スペクトル), Peak Information (ピーク情報), Structure (構造), and Property/Name (プロパティ/名称).
- Search Databases (サーチ用データベース):** Includes a radio button for Custom Selection (カスタマイズ選択) and checkboxes for All Compounds (すべての化合物) and Pure Compounds (純粋化合物).
- Available Databases (利用できるデータベース):** A table listing databases like Reference, User DB, and Hit List.
- Selected Databases (選択されているデータベース):** A table listing selected databases with columns for Name (名称), Record (レコード), DB Code (DB コード), and Location (ロケーション).
- Display Profile (表示プロファイル):** A dropdown menu at the bottom, currently set to '<プロファイルなし>', which is highlighted with a red box.

名称	レコード	DB コード	ロケーション
11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>
13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	<Latest Version>
13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>
13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	<Latest Version>
13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>
13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds - ...	252	NNX	<Latest Version>

名称	レコード	DB コード	ロケーション
IR - Sadtler Electric Power Plant Materials - ...	1074	NEX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Electric Power Plan...
IR - Sadtler Epoxy Resins, Curing Agents & A...	694	CRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Epoxy Resins, Curin...
IR - Sadtler Flame Retardants - Wiley	598	FRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Flame Retardants - ...
IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basic) 1 - ...	1488	BPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers & Mono...
IR - Sadtler Polymers & Monomers (Basic) 2 - ...	850	BMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers & Mono...
IR - Sadtler Polymers & Monomers (Compreh...	11270	DAX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers & Mono...
IR - Sadtler Polymers, Hummel - Wiley	1907	HUX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\IR\IR - Sadtler Polymers, Hummel ...

# 検索

ピークを使用したスペクトルのデータベースの検索方法

## 目的

この演習では、ピーク検索の方法を実際に行ってみます。

## 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- ▶ ピーク検索の設定方法

## 背景

SearchIt アプリケーションでは、ピーク情報を使用してスペクトルデータやクロマトグラフィーデータを検索することができます。これにより、データベースのピークテーブルと手動で入力したりスペクトルから抽出したピークテーブルを比較することができます。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

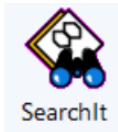
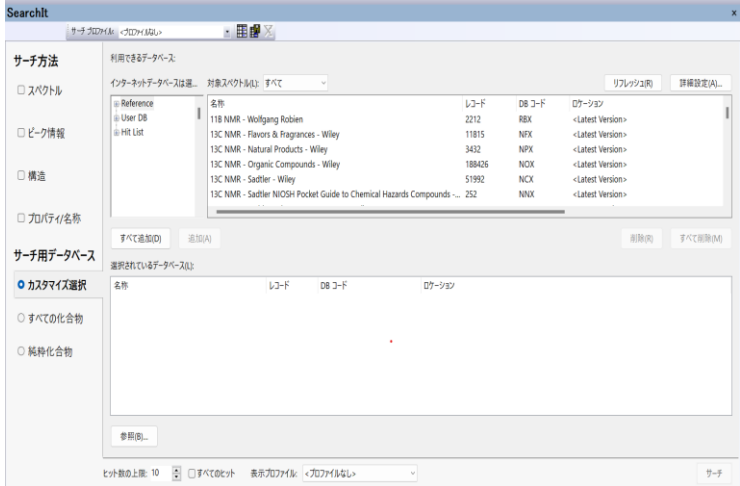
C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR  
フォルダに移動します。

- Ethyl acrylate.dx

### KnowItAll 使用アプリケーション

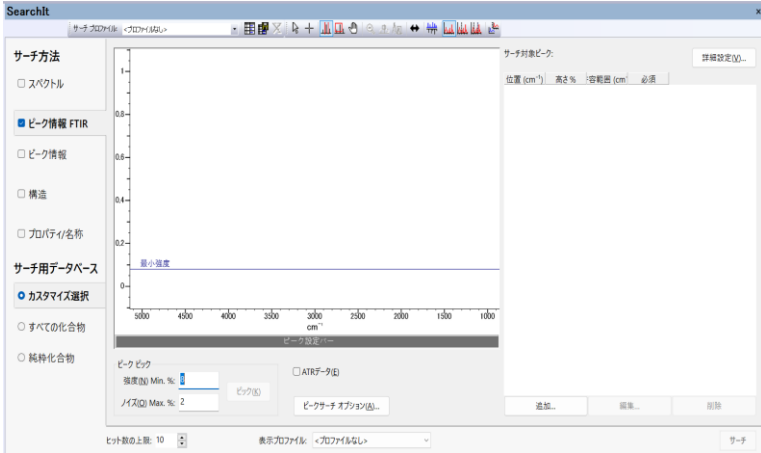
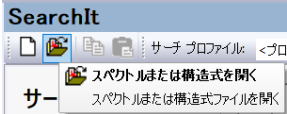
- SearchIt™
- Minelt™

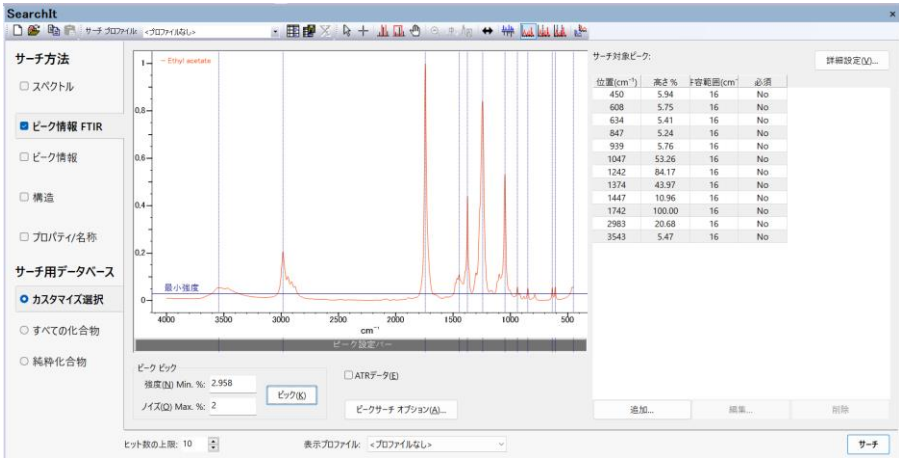
## ピーク検索の設定と実行

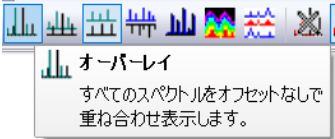
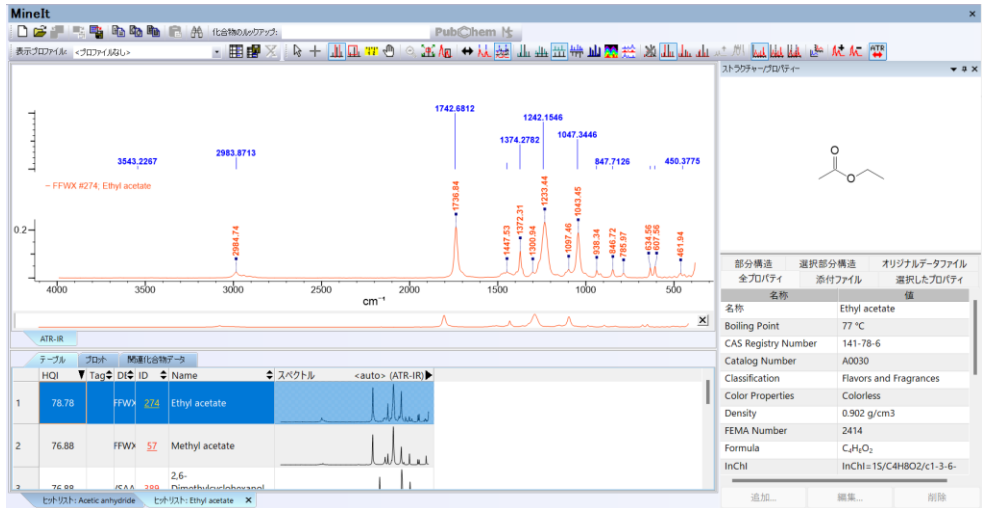
	アクション	結果																																																											
1	<p>以下の手順を実行してください：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが開いていない場合は、データツールボックスに移動し、そのアイコンをクリックします。</li> </ul>  <p>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが既に開いている場合は、現在の検索を終了するために「<b>SearchIt Close (SearchIt の終了)</b>」ボタンをクリックしてください。</p>	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションの「<b>ユーザー選択</b>」タブが表示され、最後に使用したデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに表示されます：</p>  <table border="1"> <thead> <tr> <th>検索方法</th> <th>利用可能なデータベース</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td><input type="checkbox"/> スパクトル</td> <td>インターネットデータベースは、対象スベクトル(A)：すべて</td> </tr> <tr> <td><input type="checkbox"/> ピーク情報</td> <td> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Reference</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>バージョン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>User DB</td> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>HR List</td> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Natural Products - Wiley</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Organic Compounds - Wiley</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table> </td> </tr> <tr> <td><input type="checkbox"/> 構造</td> <td></td> </tr> <tr> <td><input type="checkbox"/> プロパティ名称</td> <td></td> </tr> <tr> <td colspan="2"> <p>すべて追加(D)    追加(A)    削除(R)    すべて削除(M)</p> </td> </tr> <tr> <td colspan="2"> <p>検索用データベース</p> <p>選択されているデータベースは：</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>カスタマイズ選択</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>バージョン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td><input checked="" type="radio"/></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p><input type="radio"/> すべての化合物    <input type="radio"/> 純粋化合物</p> <p>参照(R)...</p> <p>7/1 外部数の上限: 10    <input type="checkbox"/> すべてのヒット    表示オプション: &lt;プロファイルなし&gt;    サーチ</p> </td> </tr> </tbody> </table>	検索方法	利用可能なデータベース	<input type="checkbox"/> スパクトル	インターネットデータベースは、対象スベクトル(A)：すべて	<input type="checkbox"/> ピーク情報	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Reference</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>バージョン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>User DB</td> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>HR List</td> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Natural Products - Wiley</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Organic Compounds - Wiley</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table>	Reference	名称	レコード	DB コード	バージョン	User DB	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>	HR List	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	<Latest Version>		13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>		13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	<Latest Version>		13C NMR - Sadler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>		13C NMR - Sadler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...	252	NNX	<Latest Version>	<input type="checkbox"/> 構造		<input type="checkbox"/> プロパティ名称		<p>すべて追加(D)    追加(A)    削除(R)    すべて削除(M)</p>		<p>検索用データベース</p> <p>選択されているデータベースは：</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>カスタマイズ選択</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>バージョン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td><input checked="" type="radio"/></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p><input type="radio"/> すべての化合物    <input type="radio"/> 純粋化合物</p> <p>参照(R)...</p> <p>7/1 外部数の上限: 10    <input type="checkbox"/> すべてのヒット    表示オプション: &lt;プロファイルなし&gt;    サーチ</p>		カスタマイズ選択	名称	レコード	DB コード	バージョン	<input checked="" type="radio"/>				
検索方法	利用可能なデータベース																																																												
<input type="checkbox"/> スパクトル	インターネットデータベースは、対象スベクトル(A)：すべて																																																												
<input type="checkbox"/> ピーク情報	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Reference</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>バージョン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>User DB</td> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>HR List</td> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Natural Products - Wiley</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Organic Compounds - Wiley</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table>	Reference	名称	レコード	DB コード	バージョン	User DB	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>	HR List	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	<Latest Version>		13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>		13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	<Latest Version>		13C NMR - Sadler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>		13C NMR - Sadler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...	252	NNX	<Latest Version>																									
Reference	名称	レコード	DB コード	バージョン																																																									
User DB	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>																																																									
HR List	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	<Latest Version>																																																									
	13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>																																																									
	13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	<Latest Version>																																																									
	13C NMR - Sadler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>																																																									
	13C NMR - Sadler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds ...	252	NNX	<Latest Version>																																																									
<input type="checkbox"/> 構造																																																													
<input type="checkbox"/> プロパティ名称																																																													
<p>すべて追加(D)    追加(A)    削除(R)    すべて削除(M)</p>																																																													
<p>検索用データベース</p> <p>選択されているデータベースは：</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>カスタマイズ選択</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>バージョン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td><input checked="" type="radio"/></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p><input type="radio"/> すべての化合物    <input type="radio"/> 純粋化合物</p> <p>参照(R)...</p> <p>7/1 外部数の上限: 10    <input type="checkbox"/> すべてのヒット    表示オプション: &lt;プロファイルなし&gt;    サーチ</p>		カスタマイズ選択	名称	レコード	DB コード	バージョン	<input checked="" type="radio"/>																																																						
カスタマイズ選択	名称	レコード	DB コード	バージョン																																																									
<input checked="" type="radio"/>																																																													



アクション	結果																																			
<p>2 もし既に検索対象としてデータベースが選択されている場合は、「すべて削除」をクリックして選択をクリアします。次に、「スペクトル技術に制限」を「IR」に設定し、「すべて追加」をクリックします。</p>	<p>Wiley IR データベースライブラリが「Selected for Searching (検索対象として選択された)」ウィンドウに追加されます：</p>  <p>The screenshot shows the 'SearchIt' window with the following data:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>検索方法</th> <th>名前</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>オプション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Reference</td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 1 - Wiley</td> <td>1161</td> <td>DWIX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>User DB</td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 2 - Wiley</td> <td>1080</td> <td>DWZX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>HR List</td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 3 - Wiley</td> <td>1012</td> <td>DW3X</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 4 - Wiley</td> <td>1142</td> <td>DW4X</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>600</td> <td>FWIX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 - Wiley</td> <td>269</td> <td>YWIX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table>	検索方法	名前	レコード	DB コード	オプション	Reference	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 1 - Wiley	1161	DWIX	<Latest Version>	User DB	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 2 - Wiley	1080	DWZX	<Latest Version>	HR List	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 3 - Wiley	1012	DW3X	<Latest Version>		ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 4 - Wiley	1142	DW4X	<Latest Version>		ATR-IR - Sadtler Flavors & Fragrances - Wiley	600	FWIX	<Latest Version>		ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 - Wiley	269	YWIX	<Latest Version>
検索方法	名前	レコード	DB コード	オプション																																
Reference	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 1 - Wiley	1161	DWIX	<Latest Version>																																
User DB	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 2 - Wiley	1080	DWZX	<Latest Version>																																
HR List	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 3 - Wiley	1012	DW3X	<Latest Version>																																
	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 4 - Wiley	1142	DW4X	<Latest Version>																																
	ATR-IR - Sadtler Flavors & Fragrances - Wiley	600	FWIX	<Latest Version>																																
	ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 - Wiley	269	YWIX	<Latest Version>																																
<p>3 「検索カテゴリー」の下にある「ピーク」をクリックします。表示されるポップアップダイアログで「IR」を選択します。</p>	<p>「スペクトル技術の選択」ダイアログが表示されるので、IR のオプションを選択します：</p>  <p>The screenshot shows the 'SearchIt' window with the 'Spectral Technology Selection' dialog box open. The dialog box has the following data:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>検索方法</th> <th>名前</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>オプション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Reference</td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 1 - Wiley</td> <td>1161</td> <td>DWIX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>User DB</td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 2 - Wiley</td> <td>1080</td> <td>DWZX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>HR List</td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 3 - Wiley</td> <td>1012</td> <td>DW3X</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 4 - Wiley</td> <td>1142</td> <td>DW4X</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>600</td> <td>FWIX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 - Wiley</td> <td>269</td> <td>YWIX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table>	検索方法	名前	レコード	DB コード	オプション	Reference	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 1 - Wiley	1161	DWIX	<Latest Version>	User DB	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 2 - Wiley	1080	DWZX	<Latest Version>	HR List	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 3 - Wiley	1012	DW3X	<Latest Version>		ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 4 - Wiley	1142	DW4X	<Latest Version>		ATR-IR - Sadtler Flavors & Fragrances - Wiley	600	FWIX	<Latest Version>		ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 - Wiley	269	YWIX	<Latest Version>
検索方法	名前	レコード	DB コード	オプション																																
Reference	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 1 - Wiley	1161	DWIX	<Latest Version>																																
User DB	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 2 - Wiley	1080	DWZX	<Latest Version>																																
HR List	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 3 - Wiley	1012	DW3X	<Latest Version>																																
	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 4 - Wiley	1142	DW4X	<Latest Version>																																
	ATR-IR - Sadtler Flavors & Fragrances - Wiley	600	FWIX	<Latest Version>																																
	ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 - Wiley	269	YWIX	<Latest Version>																																

アクション	結果
<p>4 <b>OK</b> をクリックします。</p>	<p>「<b>ピーク FTIR 検索</b>」ダイアログが表示されます：</p> 
<p>5 「<b>スペクトルまたは構造を開く</b>」をクリックします。</p>  <p>「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR」に移動します。</p> <p>「<b>Ethyl acetate.jdx</b>」を開きます。</p>	<p>選択したスペクトルが表示されます：</p> 

	アクション	結果																																																				
6	「ピック」をクリックします。	<p>現在の設定に基づいてピークテーブルが作成されます；</p>  <p>The screenshot shows the SearchIt software interface. On the left, there are search method options: 'スベクトル', 'ピーク情報 FTIR' (selected), 'ピーク情報', '構造', 'プロパティ名称', 'サーチ用データベース', 'カスタマイズ選択' (selected), 'すべての化合物', and '純粋化合物'. The main area displays an FTIR spectrum for 'Ethyl acetate' with a peak table on the right. The peak table has columns for '位置 (cm<sup>-1</sup>)', '高さ %', '幅範囲 (cm<sup>-1</sup>)', and '必須'. Below the table are buttons for '追加...', '編集...', and '削除'. At the bottom, there are settings for 'ピークピク' (Min. %: 2.958), 'ATRデータ', and 'ノイズ (Q) Max. %: 2'. A '検索' button is at the bottom right.</p> <table border="1" data-bbox="1276 451 1476 646"> <thead> <tr> <th>位置 (cm<sup>-1</sup>)</th> <th>高さ %</th> <th>幅範囲 (cm<sup>-1</sup>)</th> <th>必須</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>450</td><td>5.94</td><td>16</td><td>No</td></tr> <tr><td>608</td><td>5.75</td><td>16</td><td>No</td></tr> <tr><td>634</td><td>5.41</td><td>16</td><td>No</td></tr> <tr><td>847</td><td>5.24</td><td>16</td><td>No</td></tr> <tr><td>939</td><td>5.76</td><td>16</td><td>No</td></tr> <tr><td>1047</td><td>53.26</td><td>16</td><td>No</td></tr> <tr><td>1242</td><td>84.17</td><td>16</td><td>No</td></tr> <tr><td>1374</td><td>43.97</td><td>16</td><td>No</td></tr> <tr><td>1447</td><td>10.96</td><td>16</td><td>No</td></tr> <tr><td>1742</td><td>100.00</td><td>16</td><td>No</td></tr> <tr><td>2983</td><td>20.68</td><td>16</td><td>No</td></tr> <tr><td>3543</td><td>5.47</td><td>16</td><td>No</td></tr> </tbody> </table>	位置 (cm <sup>-1</sup> )	高さ %	幅範囲 (cm <sup>-1</sup> )	必須	450	5.94	16	No	608	5.75	16	No	634	5.41	16	No	847	5.24	16	No	939	5.76	16	No	1047	53.26	16	No	1242	84.17	16	No	1374	43.97	16	No	1447	10.96	16	No	1742	100.00	16	No	2983	20.68	16	No	3543	5.47	16	No
位置 (cm <sup>-1</sup> )	高さ %	幅範囲 (cm <sup>-1</sup> )	必須																																																			
450	5.94	16	No																																																			
608	5.75	16	No																																																			
634	5.41	16	No																																																			
847	5.24	16	No																																																			
939	5.76	16	No																																																			
1047	53.26	16	No																																																			
1242	84.17	16	No																																																			
1374	43.97	16	No																																																			
1447	10.96	16	No																																																			
1742	100.00	16	No																																																			
2983	20.68	16	No																																																			
3543	5.47	16	No																																																			
7	ヒント	<p>ピークテーブルからピークを削除するには、該当するピークを選択して削除ボタンをクリックするか、ピークバーでダブルクリックします。同様に、テーブルの下部にある対応するボタンを使用してピークを追加したり編集したりすることもできます。</p>																																																				

	アクション	結果
8	<p>「Search」をクリックします。Minelt で、「スペクトルのオーバーレイ表示」をクリックします。</p>  <p>オーバーレイ すべてのスペクトルをオフセットなしで重ね合わせ表示します。</p>	<p>検索結果は自動的に Minelt アプリケーションに表示されます:</p>  <p>各エントリに対して、スペクトルペインは検索に使用されたピークと一緒にヒットリストのスペクトルを表示します。</p>

# 検索

## スペクトルデータベースを特定の範囲で検索する方法

### 目的

この演習では、KnowItAll 情報システムの SearchIt アプリケーションを使用して、スペクトルデータベースを特定のスペクトル範囲で検索する方法を説明します。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- ▶ スペクトル検索の設定時に含有範囲バーを使用する方法
- ▶ スペクトル検索の設定時に検索マスクダイアログボックスを使用する方法

### 背景

限られた範囲でのスペクトル検索は、計算に必要なデータ点が少なく済むため、わずかに高速です。また、限られた範囲を使用することで、スペクトル検索を IR のフィンガープリント領域などの特徴豊かな領域に絞り込むことができます。具体的には、IR の 1500 波数以下のフィンガープリント領域などが該当します。さらに、不純物のピークが存在する領域を無視することで、スペクトル減算の代わりに使用することもできます。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

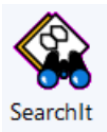

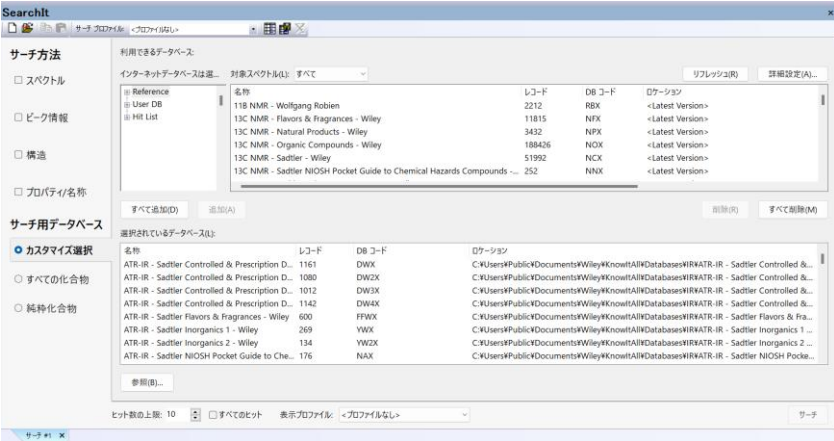

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR フォルダに移動します。

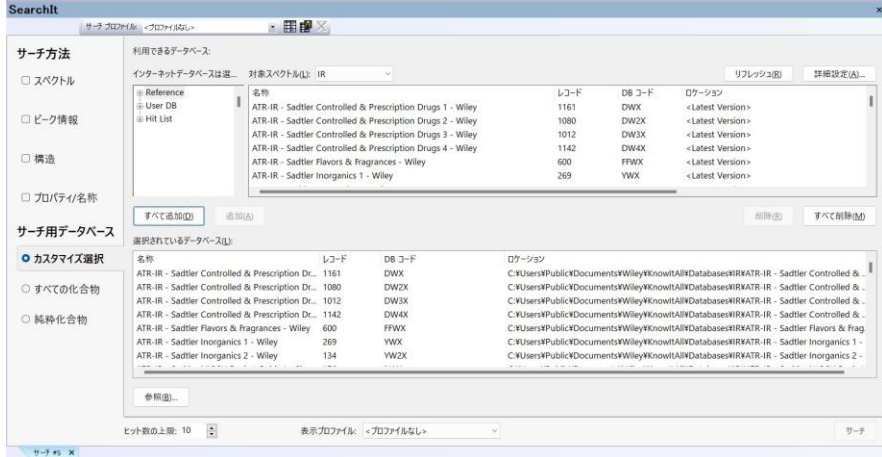
- Acetonitrile.jdx

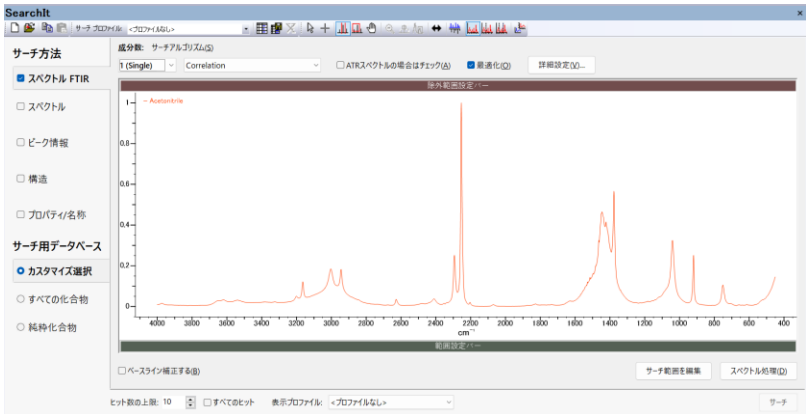
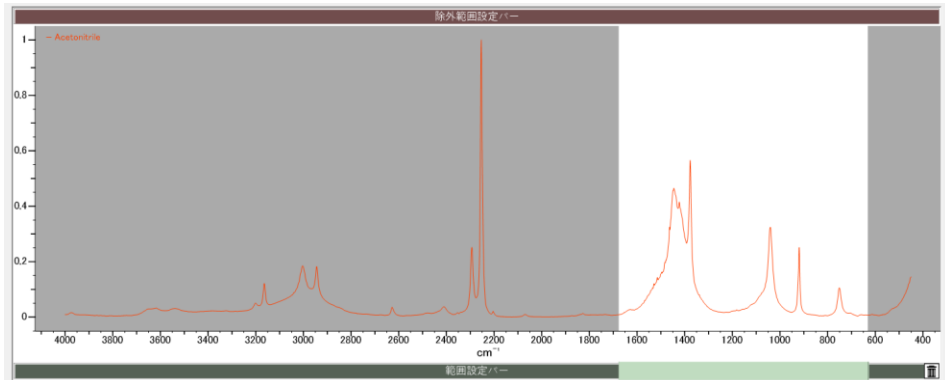
#### KnowItAll 使用アプリケーション

- SearchIt™
- Minelt™

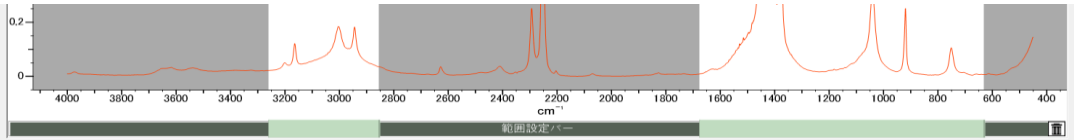

### スペクトル検索の設定

	アクション	結果
<p>1</p>	<p>以下の手順を実行してください：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが開いていない場合は、データツールボックスに移動し、そのアイコンをクリックします。</li> </ul>  <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが既に開いている場合は、現在の検索を終了するために「<b>SearchIt Close (SearchIt の終了)</b>」ボタン  をクリックしてください。</li> </ul>	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションの「<b>ユーザー選択</b>」タブが表示され最後に使用したデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに表示されます：</p> 
<p>2</p>	<p>もし既に検索のためにデータベースが選択されている場合は、「<b>すべて削除</b>」をクリックして選択をクリアします。</p>	<p>「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」ウィンドウがクリアされます：</p> 

	アクション	結果																												
3	<p>「<b>検索可能</b>」ダイアログボックスで、「<b>スペクトル技術を制限</b>」の項目で <b>IR</b> を選択し、その下の「<b>すべて追加</b>」をクリックします。</p>	<p>すると、ワイリーIR データベースコレクションが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに表示されます：</p>  <p>The screenshot shows the 'SearchIt' window with the 'Selected for Searching' list expanded. The list contains the following entries:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 1 - Wiley</td> <td>1161</td> <td>DWX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 2 - Wiley</td> <td>1080</td> <td>DW2X</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 3 - Wiley</td> <td>1012</td> <td>DW3X</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>ATR-IR - Sadtler Controlled &amp; Prescription Drugs 4 - Wiley</td> <td>1142</td> <td>DW4X</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>ATR-IR - Sadtler Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>600</td> <td>FFWX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 - Wiley</td> <td>269</td> <td>YWX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 1 - Wiley	1161	DWX	<Latest Version>	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 2 - Wiley	1080	DW2X	<Latest Version>	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 3 - Wiley	1012	DW3X	<Latest Version>	ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 4 - Wiley	1142	DW4X	<Latest Version>	ATR-IR - Sadtler Flavors & Fragrances - Wiley	600	FFWX	<Latest Version>	ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 - Wiley	269	YWX	<Latest Version>
名称	レコード	DB コード	ロケーション																											
ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 1 - Wiley	1161	DWX	<Latest Version>																											
ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 2 - Wiley	1080	DW2X	<Latest Version>																											
ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 3 - Wiley	1012	DW3X	<Latest Version>																											
ATR-IR - Sadtler Controlled & Prescription Drugs 4 - Wiley	1142	DW4X	<Latest Version>																											
ATR-IR - Sadtler Flavors & Fragrances - Wiley	600	FFWX	<Latest Version>																											
ATR-IR - Sadtler Inorganics 1 - Wiley	269	YWX	<Latest Version>																											
4	<p>「<b>検索カテゴリー</b>」の下にある「<b>スペクトル</b>」をクリックします。</p>	<p>すると、「<b>開く</b>」ダイアログボックスが表示されます。</p>																												

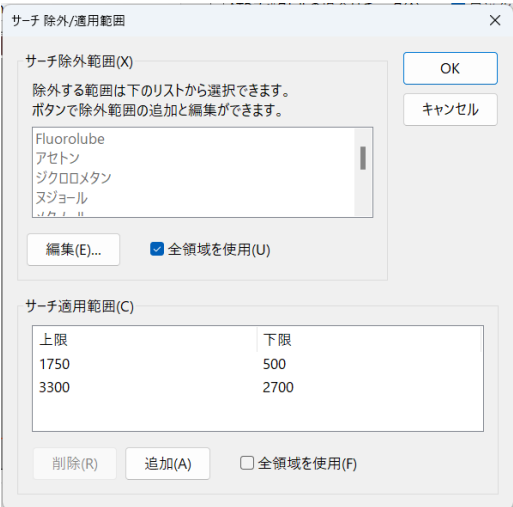
	アクション	結果
5	<p>「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR」に移動します。</p> <p>「Acetonitrile.jdx」を開きます。</p> <p>注記：「ファイルの種類」フィルターを使用して、JCAMP ファイル（またはすべてのファイル）を表示することができます。</p>	<p>スペクトルが表示されます。</p> 
6	<p>「含有範囲バー」内でクリックし、ドラッグしてから指を離すと、含有領域が定義されます。</p>	<p>含有領域は含有範囲バー内で緑色に表示され、検索に含まれるスペクトル領域は白い背景となります。検索に含まれないスペクトル領域は灰色の背景となります。</p>  <p>含有範囲機能を使用すると、スペクトル検索に含める範囲を1つ以上設定することができます。この機能は、主に個々の検索ごとに活用されます。ただし、この方法で設定した範囲は変更されるまで記憶されますが、永久的に保存されるわけではありません。</p>

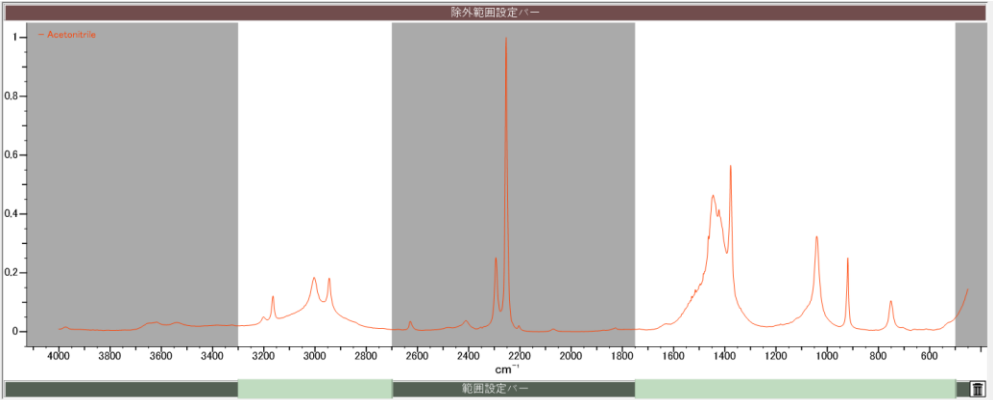
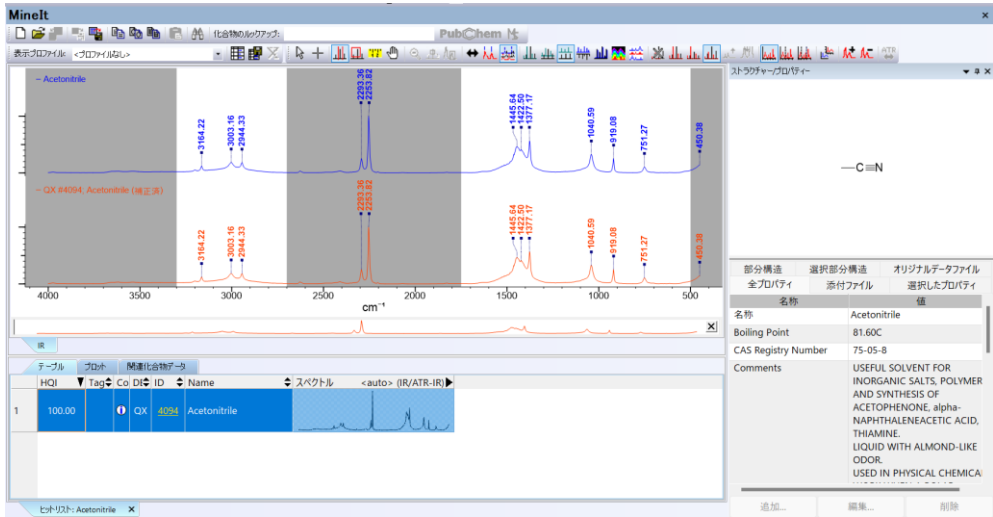


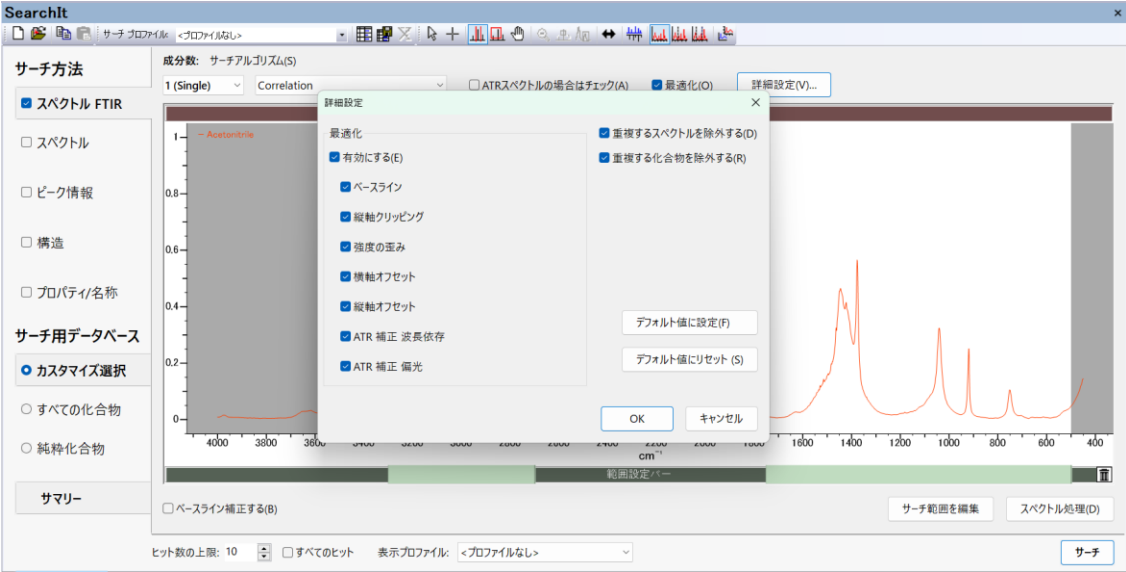
	アクション	結果
7	<p>第二の含有領域を定義するには、クリックしてドラッグします。</p> <p><b>注記：</b>領域を水平方向に移動するには、<b>含有範囲</b>バーの領域内をクリックしてドラッグし、新しい位置に移動します。</p>	<p>スペクトル上で第二の領域が選択されます：</p> 
8	<p><b>ヒント：</b></p>	<p>領域のサイズを変更するには、カーソルを<b>含有範囲</b>バー内で移動し、端点の上にカーソルを合わせた後、ドラッグして指を離します。このとき、カーソルは十字で二重の矢印に変わります。</p>  <p>単一の領域を削除するには、<b>含有範囲</b>バーの領域内をクリックしてドラッグし、スペクトルペインから離れた側にドラッグするか、領域内で右クリックして表示されるメッセージボックスで「はい」を選択します。</p> <p>すべての領域を削除するには、<b>含有範囲</b>バーの右端にあるゴミ箱のアイコンをクリックしてください。</p>

検索マスクダイアログボックスを使用します。

	アクション	結果
1	<p>含有範囲バーの右側にあるゴミ箱アイコンをクリックして、以前の検索範囲をクリアします。</p>  <p>「<b>手でマスク範囲を編集</b>」をクリックします。「<b>全範囲を使用する</b>」のチェックを外し、「<b>スペクトルの含有マスク</b>」の下にある「<b>追加</b>」をクリックします。</p> <p><b>注記:</b> 含有範囲バーで定義された含有領域は、スペクトルの含有マスクのリストに表示されます。ただし、「<b>全範囲を使用する</b>」がチェックされている場合、これらの領域は使用されません。</p>	<p>「<b>スペクトルの含有/除外マスク</b>」ウィンドウが開きます：</p> 
2	<p>残りの含有領域で<b>高い範囲</b>の値を選択し、「1750」と入力するためにクリックします。</p>	<p>「1750」が<b>高い範囲</b>の値として追加されます：</p> 

	アクション	結果
3	次に、残りの含有領域で <b>低い範囲</b> の値を選択し、「500」と入力します。	<p>「500」が<b>低い範囲</b>の値として追加されます：</p> 
4	新しい Include 領域を作成するために、「追加」をクリックします。新しい <b>高い範囲</b> のテキストボックスに「3300」と入力し、「 <b>低い範囲</b> 」の列をクリックして「2700」と入力します。	<p>これにより、<b>スペクトルの含有マスク</b>に範囲が追加されます：</p> 
	アクション	結果

	アクション	結果																																		
5	OK をクリックします。	<p>ダイアログボックスが閉じられ、再定義された含有領域が反映された検索スペクトルが表示されます。</p>  <p>The image shows an IR spectrum plot for Acetonitrile. The x-axis represents wavenumber in cm⁻¹, ranging from 4000 to 500. The y-axis represents transmittance from 0 to 1.0. Several absorption bands are visible, notably around 3300, 2900, 2200, 1400, and 1000 cm⁻¹. Two vertical grey shaded regions indicate excluded ranges: one from approximately 3400 to 3200 cm⁻¹ and another from approximately 2600 to 1800 cm⁻¹. The plot is titled '除外範囲設定バー' (Exclusion Range Setting Bar).</p>																																		
6	「Search」をクリックします。	<p>検索が実行され、結果は <b>Minelt</b> アプリケーション内で自動的にヒットリストとして表示されます。</p>  <p>The image shows the Minelt software interface. The main window displays an IR spectrum of Acetonitrile with several peaks labeled with their wavenumbers: 3164.22, 3003.16, 2944.33, 2259.52, 2259.52, 1416.50, 1412.50, 1377.17, 1040.59, 919.08, 751.27, and 462.38. The plot is titled 'Minelt' and 'PubChem'. Below the plot is a table of search results:</p> <table border="1" data-bbox="701 1175 1150 1338"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Intensity</th> <th>Tag</th> <th>Col</th> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>100.00</td> <td>OX</td> <td>4094</td> <td>Acetonitrile</td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p>On the right side of the interface, there is a '部分構造' (Substructure) section with a table:</p> <table border="1" data-bbox="1423 1078 1688 1338"> <thead> <tr> <th>部分構造</th> <th>選択部分構造</th> <th>オリジナルデータファイル</th> </tr> <tr> <th>全プロパティ</th> <th>添付ファイル</th> <th>選択したプロパティ</th> </tr> <tr> <th colspan="2">名称</th> <th>値</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>名称</td> <td>Acetonitrile</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Boiling Point</td> <td>81.60C</td> <td></td> </tr> <tr> <td>CAS Registry Number</td> <td>75-05-8</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Comments</td> <td colspan="2">USEFUL SOLVENT FOR INORGANIC SALTS, POLYMER AND SYNTHESIS OF ACETOPHENONE, alpha-NAPHTHALENEACETIC ACID, THIAMINE. LIQUID WITH ALMOND-LIKE ODDOR. USED IN PHYSICAL CHEMICA</td> </tr> </tbody> </table> <p>Below the table, there are buttons for '追加...' (Add...), '編集...' (Edit...), and '削除' (Delete).</p> <p>結果テーブルの情報アイコン  をクリックすると、行われた最適化補正が表示されます。</p>	Hit	Intensity	Tag	Col	ID	Name	スペクトル	1	100.00	OX	4094	Acetonitrile		部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ	名称		値	名称	Acetonitrile		Boiling Point	81.60C		CAS Registry Number	75-05-8		Comments	USEFUL SOLVENT FOR INORGANIC SALTS, POLYMER AND SYNTHESIS OF ACETOPHENONE, alpha-NAPHTHALENEACETIC ACID, THIAMINE. LIQUID WITH ALMOND-LIKE ODDOR. USED IN PHYSICAL CHEMICA	
Hit	Intensity	Tag	Col	ID	Name	スペクトル																														
1	100.00	OX	4094	Acetonitrile																																
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																																		
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ																																		
名称		値																																		
名称	Acetonitrile																																			
Boiling Point	81.60C																																			
CAS Registry Number	75-05-8																																			
Comments	USEFUL SOLVENT FOR INORGANIC SALTS, POLYMER AND SYNTHESIS OF ACETOPHENONE, alpha-NAPHTHALENEACETIC ACID, THIAMINE. LIQUID WITH ALMOND-LIKE ODDOR. USED IN PHYSICAL CHEMICA																																			

アクション	結果
<p>7 最適化補正ウィンドウを閉じ、KnowItAllBack ボタンを使用して SearchIt アプリケーションに戻ります。</p> <p>スペクトル FTIR タブの「詳細設定」をクリックします。</p>	<p>「詳細設定」ダイアログボックスが開きます：</p>  <p>「詳細設定」ダイアログでは、適用される最適化補正の設定を制御することができます。</p>

# 検索

## スペクトルデータベースを検索する際に、特定の領域を除外するためにマスクを使用する方法

### 目的

この演習では、スペクトル検索において特定の領域を除外するためのマスクを作成する方法を説明します。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- ▶ スペクトル検索の設定時に、除外マスクを作成して使用する方法

### 背景

除外マスクは、スペクトル検索時に特定の領域を無視するために使用されます。溶媒や不純物などの様々な化合物に対して、除外マスクを定義することができます。このマスクを使用することで、検索中に該当領域を考慮しないようにすることができます。

除外マスクは保存され、再利用することができます。一方、含有領域 (Include Regions) は一時的なものであり、一度の検索にのみ適用されます。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

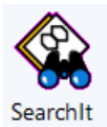

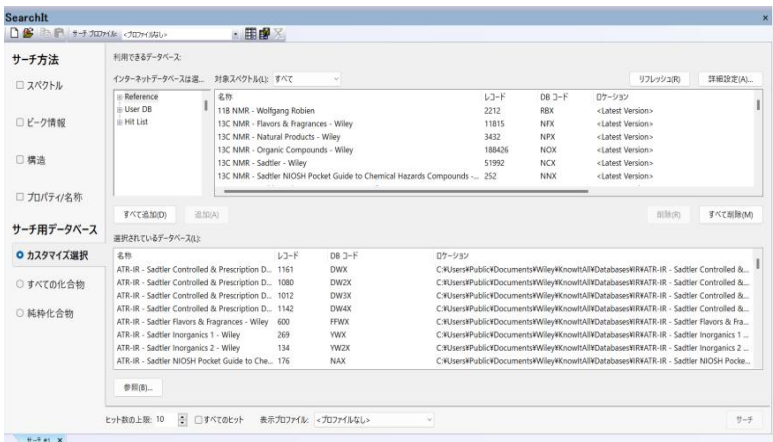

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR  
フォルダに移動します。

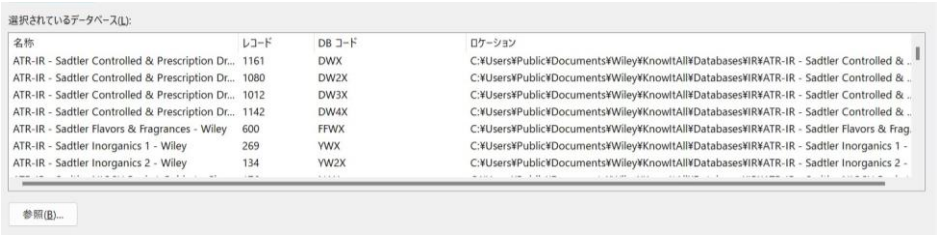
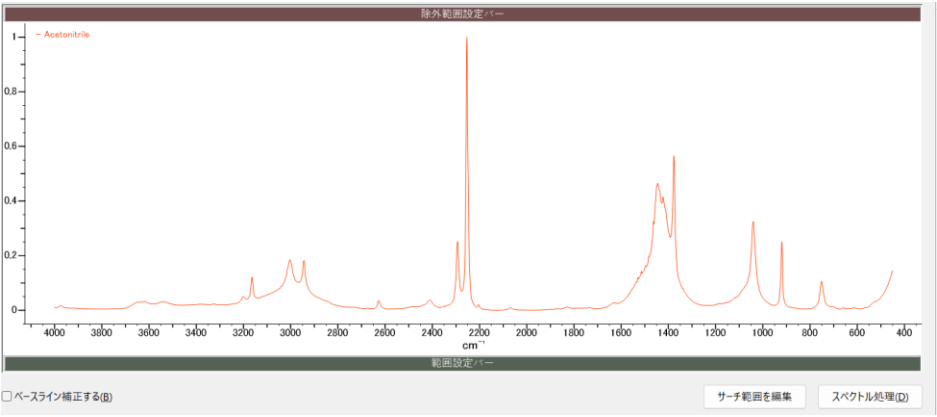
- Acetonitrile.jdx

#### KnowItAll 使用アプリケーション

- SearchIt™
- Minelt™

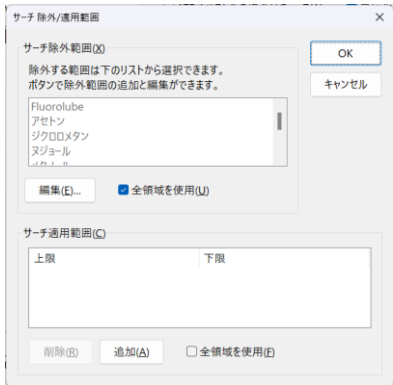
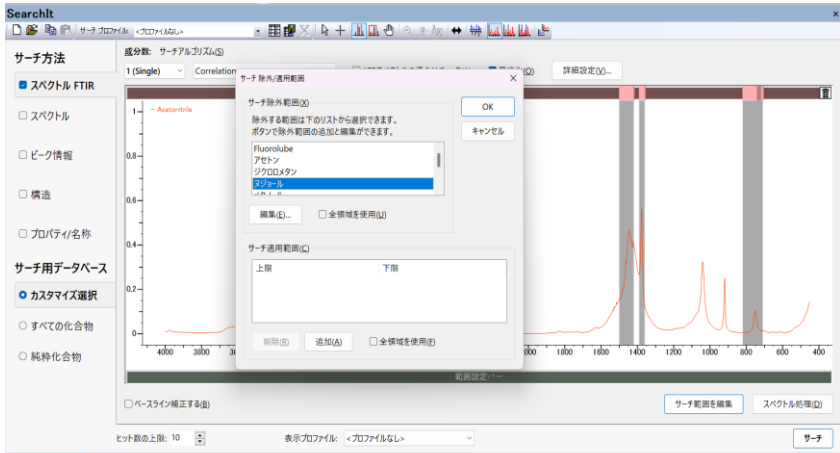
スペクトル検索の設定

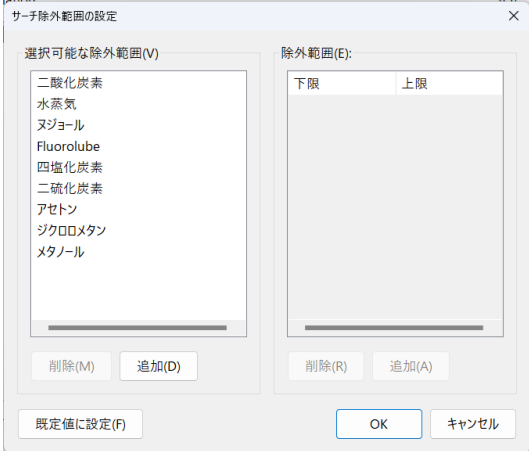
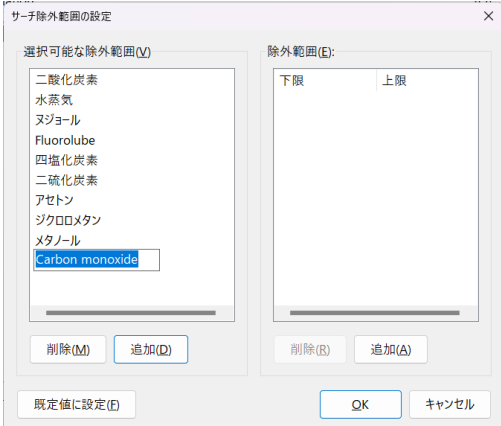
	アクション	結果
<p>1</p>	<p>以下の手順を実行してください：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが開いていない場合は、データツールボックスに移動し、そのアイコンをクリックします。</li> </ul>  <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが既に開いている場合は、現在の検索を終了するために「<b>SearchIt Close (SearchIt の終了)</b>」ボタン  をクリックしてください。</li> </ul>	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションの「<b>ユーザー選択</b>」タブが表示され最後に使用したデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに表示されます：</p> 
<p>2</p>	<p>もし既に検索のためにデータベースが選択されている場合は、「<b>すべて削除</b>」をクリックして選択をクリアします。</p>	<p>「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」ウィンドウがクリアされます：</p> 

アクション	結果
<p>3 スペクトル技術制御に制限を使用して「IR」を選択し、それに続いて「すべて追加」をクリックします。</p>	<p>すると、ワイリーIR データベースコレクションが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに表示されます：</p>  <p>注記：多くのデータベースは IR スペクトルのみを含んでいますが、一部のデータベース（例: Multi-Technique Sadtler Demo Database - Wiley (マルチテクニック サドラー デモ データベース - ワイリー)）には他の種類のスペクトルや化合物構造も含まれています。</p>
<p>4 「検索カテゴリー」の下にある「スペクトル」をクリックします。</p>	<p>すると、<b>[開く]</b>ダイアログボックスが表示されます。</p>
<p>5 「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR」に移動します。「Acetonitrile.jdx」を開きます。</p> <p>注記：「ファイルの種類」フィルターを使用して、JCAMP ファイル（またはすべてのファイル）を表示することができます。</p>	<p>IR スペクトルは「IR スペクトル」タブに表示されます：</p>  <p>☐ ベースライン補正する(B)      サーチ範囲を編集      スペクトル処理(D)</p>

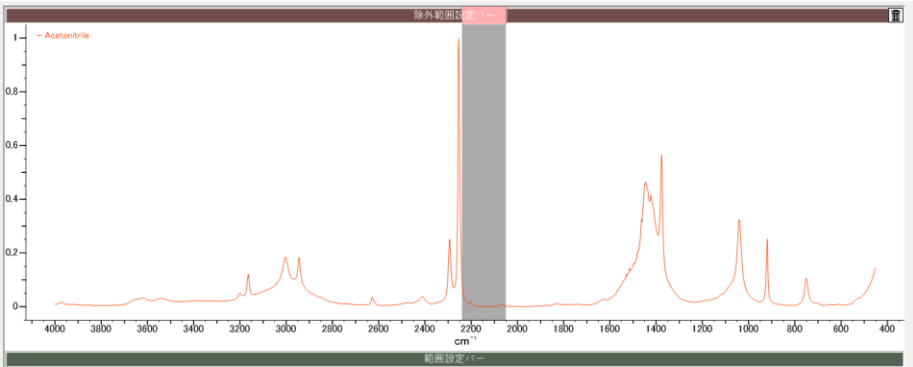
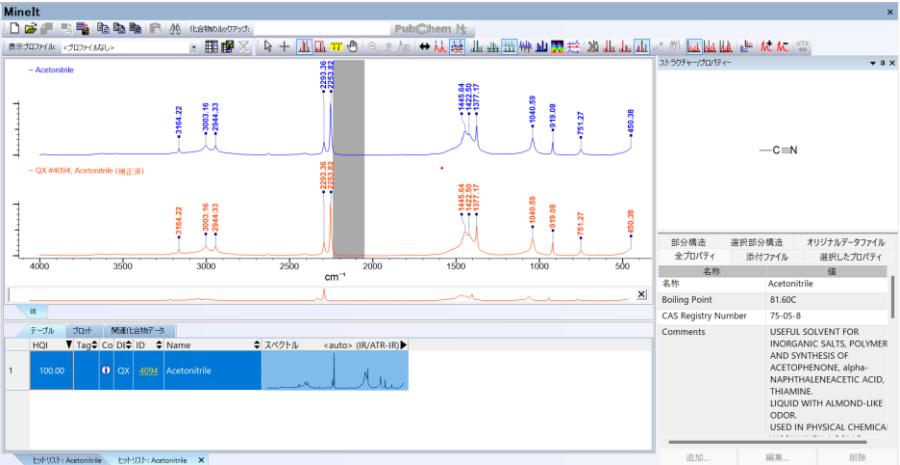


検索マスクダイアログボックスを使用します。

	アクション	結果
1	<p>「<b>手でマスク範囲を編集</b>」をクリックしてください。</p>	<p>「<b>スペクトルの含有/除外マスク</b>」ウィンドウが開きます：</p> 
2	<p>「<b>スペクトルの除外マスク</b>」のリストの下にある「<b>全範囲を使用する</b>」のチェックを外し、<b>Nujol mull</b> 除外マスクを選択します。</p>	<p>除外された領域は、<b>除外範囲</b>バーで明るい赤色でハイライト表示され、スペクトル上ではグレーで表示されます。二酸化炭素除外マスクには2つの領域が含まれています：</p> 

	アクション	結果
3	<p>スペクトルの含有/除外マスクのダイアログボックスで、「編集 (Edit)」をクリックしてください。</p>	<p>「除外マスク設定」のダイアログボックスが表示されます：</p> 
4	<p>「追加 (Add)」をクリックしてください。"Carbon monoxide"と入力し、その後、テキストボックスの外をクリックしてください。</p>	<p>"利用可能な除外マスク設定"の下にテキストボックスが表示され、そこに"Carbon Monoxide"を入力することができます：</p> 

	アクション	結果
5	<p>「利用可能な除外マスク設定」のリストで「Carbon monoxide (一酸化炭素)」を選択した状態で、「除外領域」のリストの下にある「追加 (Add)」をクリックするか、または「低い範囲 (Low Range)」の下をクリックしてください。その後、低い範囲と高い範囲の値 (2050 と 2240) を入力してください。</p>	<p>そうすると、「除外領域」の下に、低い範囲と高い範囲の値を入力するためのテキストボックスが表示されます：</p> 
6	<p>ヒント:</p>	<p>または、除外範囲バーを使用して手で除外範囲を設定することもできます。範囲を選択するためにクリックしてドラッグするだけです。スペクトル内で特定の範囲を検索する方法については、前述の「スペクトルデータベースを特定の範囲で検索する方法」のセクションをご参照ください。除外範囲を手動で設定する方法は、含有範囲を手動で設定する方法と同様です。</p>
7	<p>OK をクリックします。</p>	<p>「除外マスク設定」のダイアログボックスが閉じられ、新しい一酸化炭素のマスクが除外マスクのリストに追加されます。</p> 

アクション	結果
<p>8 新しい一酸化炭素のマスクを選択し、その後「OK」をクリックして「スペクトルの含有/除外マスク」のダイアログボックスを閉じます。</p>	<p>ダイアログボックスが閉じられると、新たに定義された除外範囲を持つ検索スペクトルが表示されます：</p> 
<p>9 「Search」をクリックします。</p>	<p>検索結果は、Minelt アプリケーション内で自動的にヒットリストとして表示されます。</p> 

# 検索

## あるスペクトルからスペクトルの減算を行う方法

### 目的

これらの演習では、KnowItAll 情報システムのスペクトル減算機能の使用方法を説明します。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- KnowItAll 情報システムのスペクトル減算機能の使い方

### 背景

KnowItAll 情報システムの ProcessIt アプリケーションを使用すると、スペクトル同士を点ごとに減算することができます。この機能は、混合物や複合スペクトルを分析する際に役立ちます。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

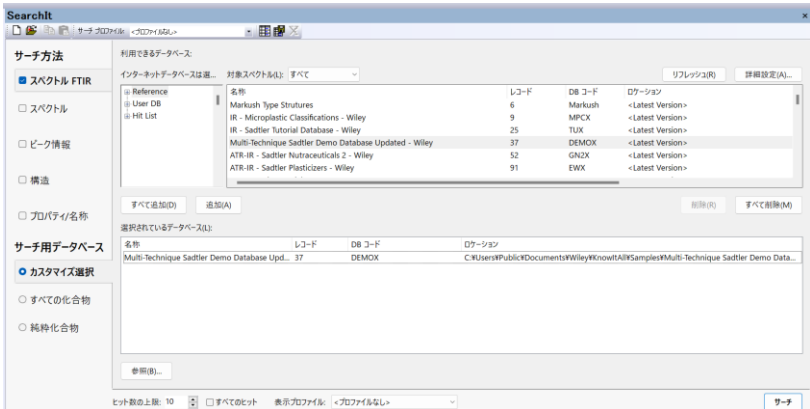
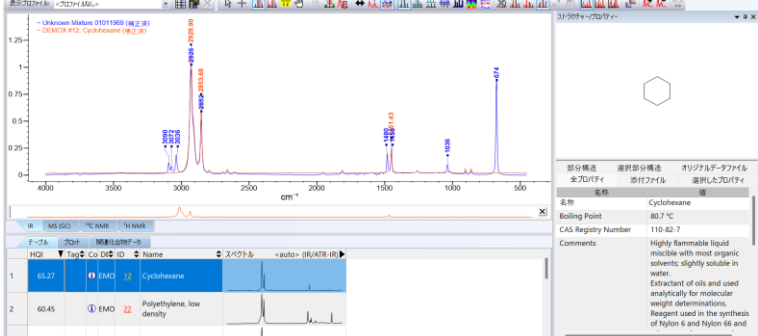
C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Mixture Analysis\IR Examples

- "Unknown Mixture 01011969.jdx"ファイル

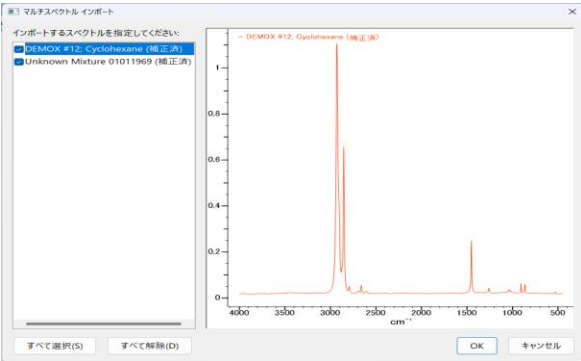
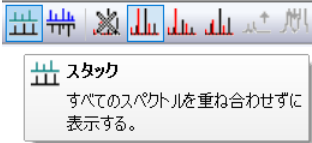
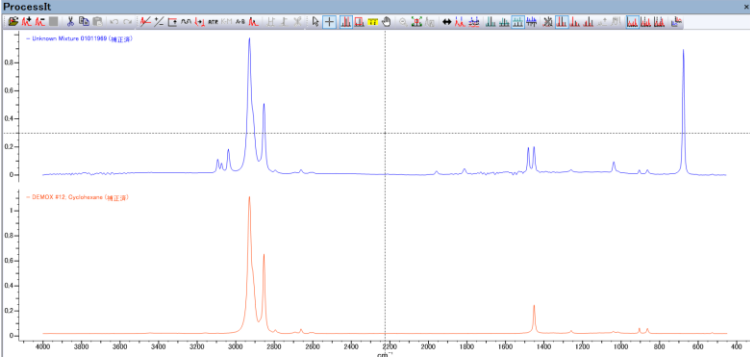
#### KnowItAll 使用アプリケーション


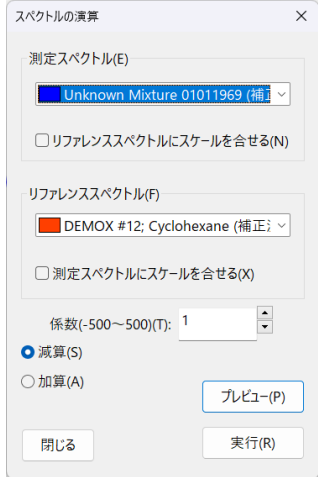
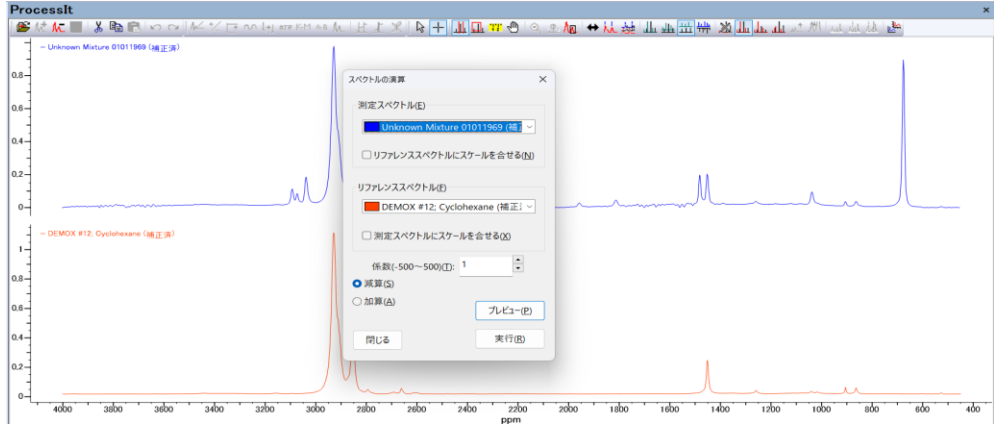
- SearchIt™
- Minel™
- ProcessIt™ IR

混合物に対するスペクトル検索の設定

	アクション	結果
1	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションでは、「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Mixture Analysis\IR Examples」に移動し、<b>Unknown Mixture 01011969.jdx</b> を開きます。データベース検索を行います。検索範囲を「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Sample」フォルダ内の Multi-Technique Sadtler Demo Database - Wiley に限定するため、「<b>閲覧で開く</b>」ボタンを使用します。</p>	<p><b>SearchIt</b> で FTIR スペクトルが開かれ、検索対象として DEMOX データベースが選択されます：</p> 
2	<p>「<b>Search</b>」をクリックします。</p>	<p>検索結果は <b>Minelt</b> アプリケーションで表示されます。最初の一致はシクロヘキサンです。クエリースペクトルと最初の一致スペクトルがスペクトルペインに表示されます。</p> 

### 差分スペクトルを作成

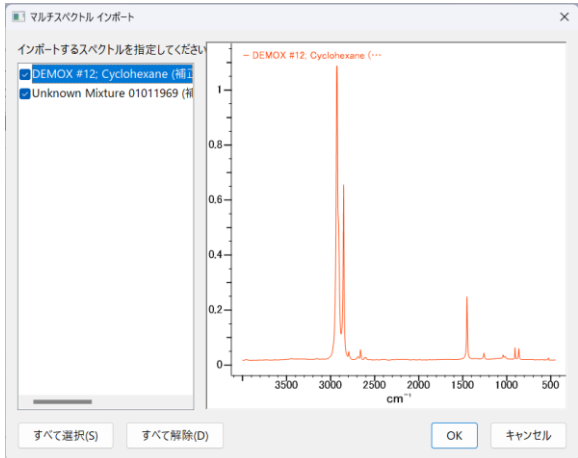

	アクション	結果
1	<p><b>Minelt</b> で表示されたヒットリストから、最初のレコードを選択した状態で、<b>Transfer to</b> (転送先) バーにある <b>ProcessIt</b> をクリックします。</p>	<p>「複数のスペクトルのインポート」ダイアログボックスが表示されます。</p>  <p>クエリースペクトルと最初の一致スペクトルが表示されます。</p>
2	<p>「すべて選択」をクリックし、その後、「複数のスペクトルのインポート」ダイアログボックスの <b>OK</b> をクリックします。</p> <p><b>Minelt</b> で「スタックスペクトラビュー」をクリックします。</p> 	<p>混合物スペクトルと最初の一致スペクトル (シクロヘキサン) が <b>ProcessIt IR</b> アプリケーションに転送されます:</p>  <p><b>注記:</b> スペクトルの表示を調整するために、スペクトルツールバーのボタンを使用します。スペクトルの差分を作成する場合、スタック表示がオフセットやオーバーレイよりも適しています。</p>
	アクション	結果

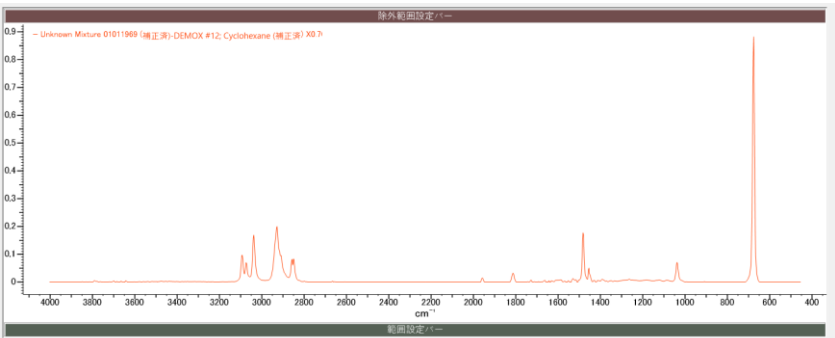
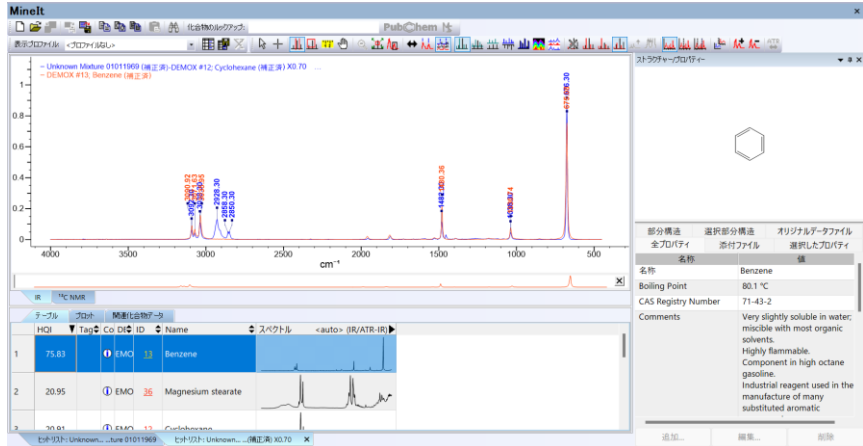
	アクション	結果
3	<p>「処理」 &gt; 「スペクトルの加算/減算」を選択します。</p> <p>注記：ツールバーボタン  でも操作できます。ただし、2つ以上のスペクトルが開かれていない場合は、このコマンドは使用できません。</p>	<p>「加算/減算」ダイアログボックスが表示されます。アクティブなスペクトルは参照となるスペクトルとして扱われます：</p> 
4	<p>混合物スペクトルが「<b>実験スペクトル</b>」として、シクロヘキサンが「<b>参照スペクトル</b>」として設定されていることを確認してください。必要に応じて、ドロップダウンリストを使用してこれらの割り当てを変更することもできます。<b>プレビュー</b>をクリックします。</p>	<p>差分スペクトルのプレビューが表示されます：</p> 



	アクション	結果
5	<p>「加算/減算」ダイアログボックスで、<b>ファクター</b>を約 0.7 に調整してください。その後、「<b>置換</b>」をクリックします。</p>	<p>メッセージボックスが表示され、負の値をゼロに切り捨てるかどうか尋ねられます：</p> 
6	<p>「はい」をクリックしてください。</p>	<p>混合物スペクトルは差分スペクトルで置き換えられます：</p> 

## 差分スペクトルを使用して検索を繰り返します

	アクション	結果
1	<p><b>Transfer to</b> バーで <b>SearchIt</b> をクリックしてください。</p> <p><b>Transfer to:</b></p>	<p>「複数のスペクトルのインポート」ダイアログボックスが表示されます。</p> 
2	<p><b>DEMOX #12</b> シクロヘキサンの選択を解除し、差分スペクトルのみを選択して、「OK」をクリックしてください。</p>	<p>メッセージボックスが表示されます：</p> 

	アクション	結果																		
3	<p>「新しい検索を開始する」をクリックしてください。</p>	<p>差分スペクトルが <b>SearchIt</b> に読み込まれます；</p> 																		
4	<p>「ユーザー選択」タブをクリックし、検索には「<b>Multi-Technique Sadtler Demo Database - Wiley</b>」が選択されていることを確認してください。</p> <p>「<b>Search</b>」をクリックします。</p>	<p>結果は <b>Minelt</b> アプリケーションに表示されます。最初のヒットはベンゼンで、混合物のもう一つの成分です。</p>  <table border="1" data-bbox="1276 1015 1503 1235"> <thead> <tr> <th>部分構造</th> <th>選択部分構造</th> <th>オリジナルデータファイル</th> </tr> <tr> <th>全アバシティ</th> <th>添付ファイル</th> <th>選択したアバシティ</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>名称</td> <td>名称</td> <td>Benzene</td> </tr> <tr> <td>Boiling Point</td> <td>80.1 °C</td> <td></td> </tr> <tr> <td>CAS Registry Number</td> <td>71-43-2</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Comments</td> <td colspan="2">Very slightly soluble in water; miscible with most organic solvents. Highly flammable. Component in high octane gasoline. Industrial reagent used in the manufacture of many substituted aromatic</td> </tr> </tbody> </table>	部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全アバシティ	添付ファイル	選択したアバシティ	名称	名称	Benzene	Boiling Point	80.1 °C		CAS Registry Number	71-43-2		Comments	Very slightly soluble in water; miscible with most organic solvents. Highly flammable. Component in high octane gasoline. Industrial reagent used in the manufacture of many substituted aromatic	
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																		
全アバシティ	添付ファイル	選択したアバシティ																		
名称	名称	Benzene																		
Boiling Point	80.1 °C																			
CAS Registry Number	71-43-2																			
Comments	Very slightly soluble in water; miscible with most organic solvents. Highly flammable. Component in high octane gasoline. Industrial reagent used in the manufacture of many substituted aromatic																			

# 検索

## 構造検索の方法を実行する方法

### 目的

この演習では、SearchIt アプリケーションを使用して構造検索を行う方法を示します。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- 正確な一致の構造検索の方法
- 部分構造の検索の方法

## 背景

SearchIt アプリケーションでは、科学者は化学構造に含まれる構造フラグメントを検索条件として使用して、それにマッチする化合物を特定することができます。この機能は、構造フラグメントを取得するために便利です。部分構造検索は、化合物の分子構造全体を分析するため、最大のフラグメントだけでなく、常に行われます。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています



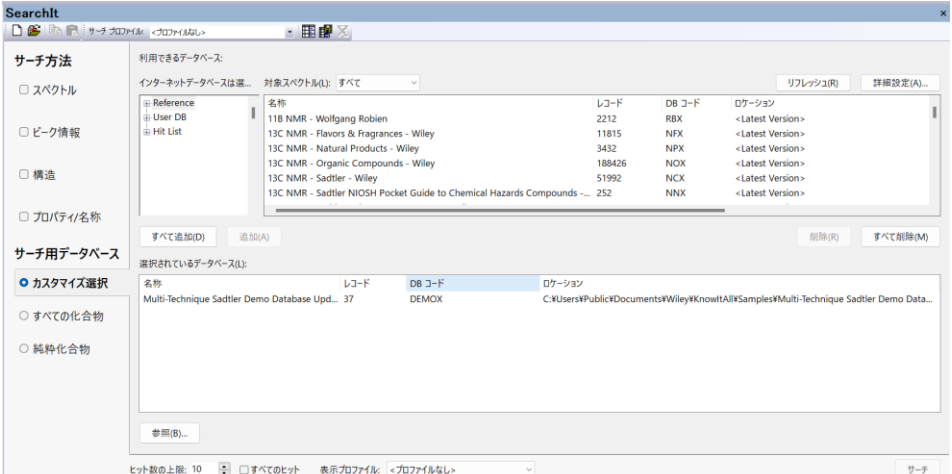
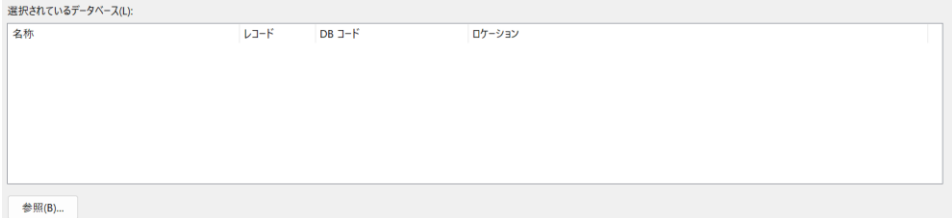
C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Structures

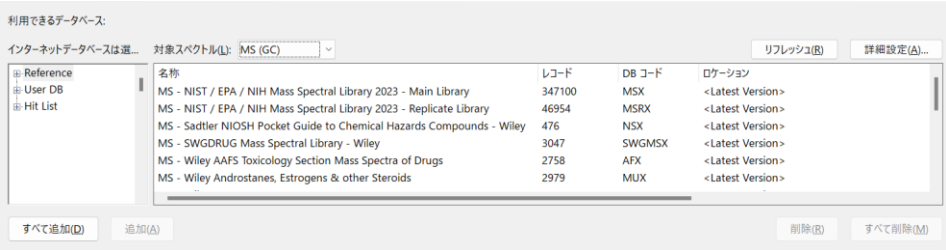
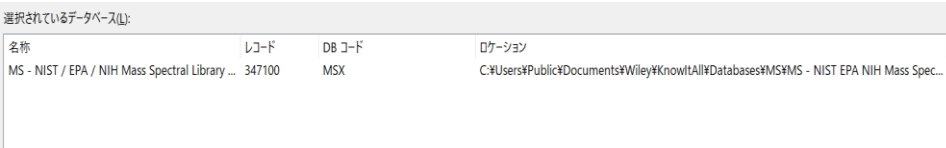
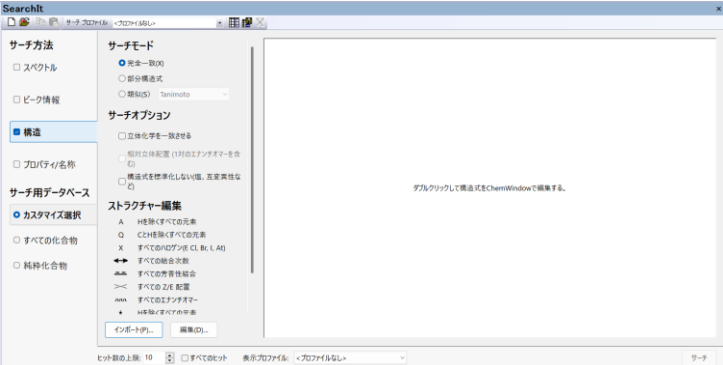
- tryptophan.dsf
- benzenethiol.dsf

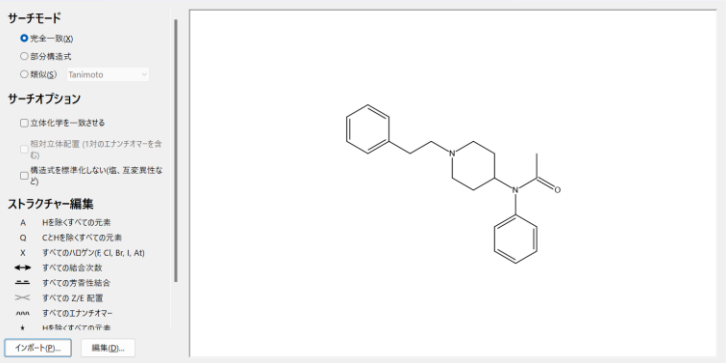
#### KnowItAll 使用アプリケーション

- SearchIt™
- Minelt™
- ChemWindow®

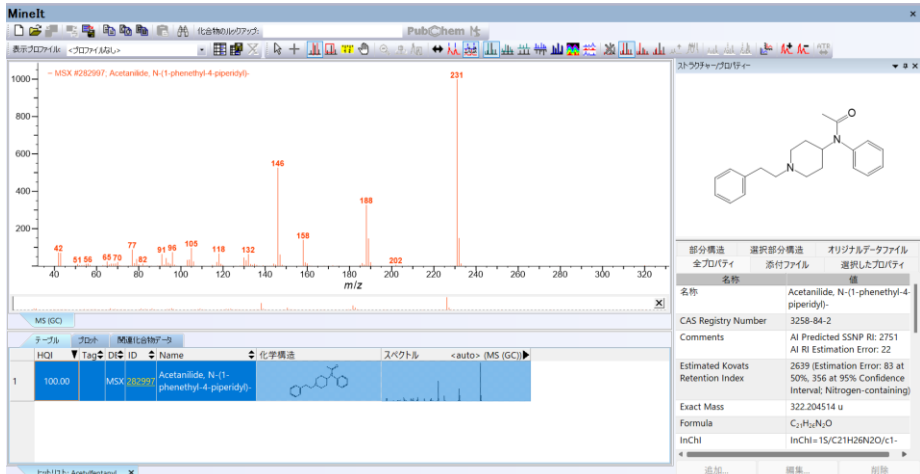
## 正確な構造一致の検索を設定

	アクション	結果																												
1	<p>以下の手順を実行してください：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが開いていない場合は、データツールボックスに移動し、そのアイコンをクリックします。</li> </ul>  <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが既にある場合は、現在の検索を終了するために「SearchIt Close (SearchIt の終了)」ボタン  をクリックしてください。</li> </ul>	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションの「ユーザー選択」タブが表示され最後に使用したデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに表示されます：</p>  <p>The screenshot shows the SearchIt interface with the following data in the 'Selected for Searching' list:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>バージョン</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>11815</td> <td>NPX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Natural Products - Wiley</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Organic Compounds - Wiley</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds - ...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table>	名称	レコード	DB コード	バージョン	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NPX	<Latest Version>	13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>	13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds - ...	252	NNX	<Latest Version>
名称	レコード	DB コード	バージョン																											
11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>																											
13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NPX	<Latest Version>																											
13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	<Latest Version>																											
13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	<Latest Version>																											
13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>																											
13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds - ...	252	NNX	<Latest Version>																											
2	<p>もし既に検索のためにデータベースが選択されている場合は、「<b>すべて削除</b>」をクリックして選択をクリアします。</p>	<p>もし既に検索のためにデータベースが選択されている場合は、「<b>すべて削除</b>」をクリックして選択をクリアします：</p>  <p>The screenshot shows the SearchIt interface with the 'Selected for Searching' list. The 'すべて削除' button is highlighted in red.</p>																												

	アクション	結果																																			
3	「スペクトル技術に制限」を「MS (GC)」に設定してください。	<p>これにより、MS スペクトルデータを持つデータベースのみが表示されます：</p>  <table border="1" data-bbox="659 423 1583 553"> <thead> <tr> <th>Reference</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>User DB</td> <td>MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Main Library</td> <td>347100</td> <td>MSX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>Hit List</td> <td>MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Replicate Library</td> <td>46954</td> <td>MSRX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>MS - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds - Wiley</td> <td>476</td> <td>NSX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>MS - SWGDRUG Mass Spectral Library - Wiley</td> <td>3047</td> <td>SWGMSX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>MS - Wiley AAFS Toxicology Section Mass Spectra of Drugs</td> <td>2758</td> <td>AFX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>MS - Wiley Androstanes, Estrogens &amp; other Steroids</td> <td>2979</td> <td>MUX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table>	Reference	名称	レコード	DB コード	ロケーション	User DB	MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Main Library	347100	MSX	<Latest Version>	Hit List	MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Replicate Library	46954	MSRX	<Latest Version>		MS - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds - Wiley	476	NSX	<Latest Version>		MS - SWGDRUG Mass Spectral Library - Wiley	3047	SWGMSX	<Latest Version>		MS - Wiley AAFS Toxicology Section Mass Spectra of Drugs	2758	AFX	<Latest Version>		MS - Wiley Androstanes, Estrogens & other Steroids	2979	MUX	<Latest Version>
Reference	名称	レコード	DB コード	ロケーション																																	
User DB	MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Main Library	347100	MSX	<Latest Version>																																	
Hit List	MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Replicate Library	46954	MSRX	<Latest Version>																																	
	MS - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds - Wiley	476	NSX	<Latest Version>																																	
	MS - SWGDRUG Mass Spectral Library - Wiley	3047	SWGMSX	<Latest Version>																																	
	MS - Wiley AAFS Toxicology Section Mass Spectra of Drugs	2758	AFX	<Latest Version>																																	
	MS - Wiley Androstanes, Estrogens & other Steroids	2979	MUX	<Latest Version>																																	
4	「MS - NIST EPA NIH Mass Spectral Library (MS - NIST EPA NIH 質量スペクトルライブラリー)」データベースを検索対象に選択してください。	<p>選択したデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」ウィンドウに追加されます：</p>  <table border="1" data-bbox="659 699 1598 748"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library ...</td> <td>347100</td> <td>MSX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\MS\MS - NIST EPA NIH Mass Spec...</td> </tr> </tbody> </table>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library ...	347100	MSX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\MS\MS - NIST EPA NIH Mass Spec...																											
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																		
MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library ...	347100	MSX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\MS\MS - NIST EPA NIH Mass Spec...																																		
5	「検索カテゴリー」の下にある「構造」をクリックしてください。	<p>「構造の検索」ダイアログが表示されます。</p> 																																			

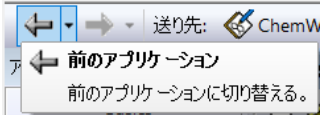
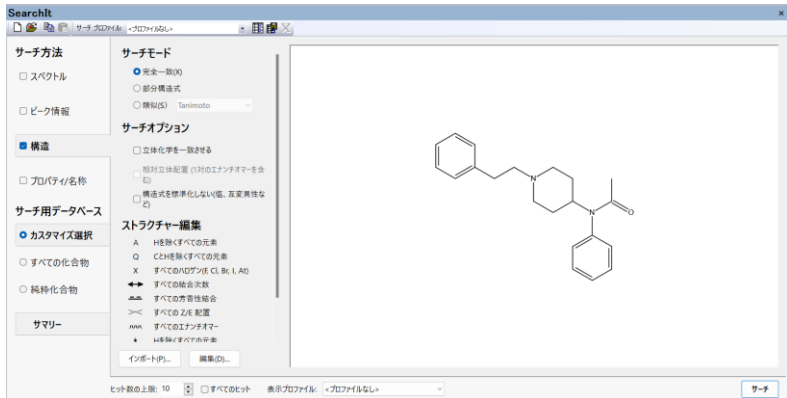
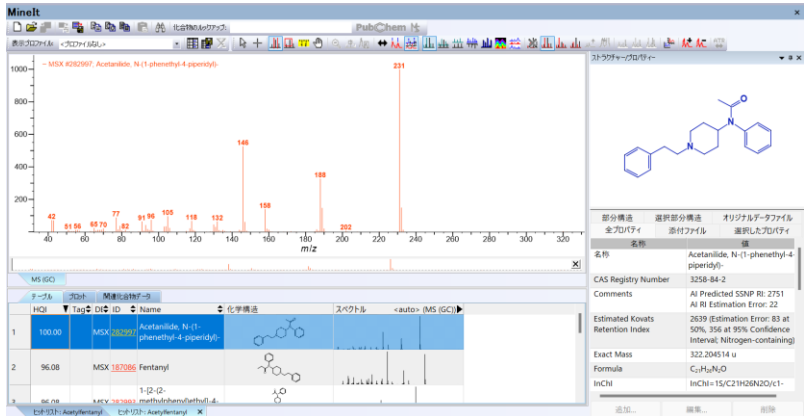
	アクション	結果
6	<p>「Open file... (ファイルを開く)」 ボタンをクリックしてください。</p> <p>「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\ Samples\Structures」に移動し、Acetylfentanyl.cdxx を選択してください。</p> <p>注記：または、「ChemWindow」アプリケーションを使用して構造を作成するために「描画/編集」をクリックすることもできます。</p>	<p>構造が「Structure」タブに表示されます:</p>  <p>検索モード</p> <ul style="list-style-type: none"><li><input checked="" type="radio"/> 完全一致 (X)</li><li><input type="radio"/> 部分構造式</li><li><input type="radio"/> 類似 (S) Tanimoto</li></ul> <p>検索オプション</p> <ul style="list-style-type: none"><li><input type="checkbox"/> 立体化学を一致させる</li><li><input type="checkbox"/> 相対立体配置 (1対のエナンチオマーを含む)</li><li><input type="checkbox"/> 構造式を標準化しない (互変異性を含む)</li></ul> <p>ストラクチャー編集</p> <ul style="list-style-type: none"><li>A Hを除くすべての元素</li><li>Q CとHを除くすべての元素</li><li>X すべてのハロゲン (Cl, Br, I, At)</li><li>↔ すべての結合次数</li><li>≡ すべての芳香性結合</li><li>&gt;= すべての Z/E 配置</li><li>AAA すべてのエナンチオマー</li><li>↓ Hを除くすべての元素</li></ul> <p>インポート (I)...    編集 (E)...</p>

## 正確な構造一致の検索を実行

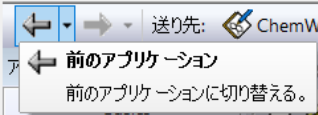

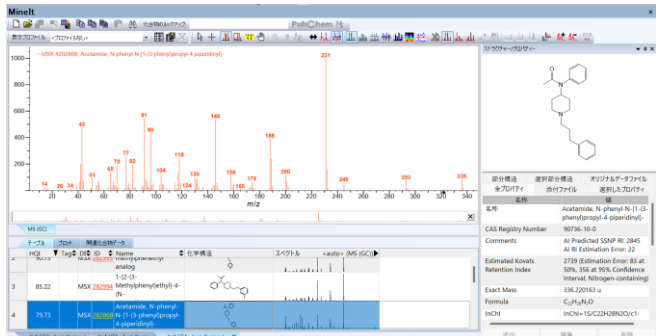
	アクション	結果																														
1	「検索モード」で「正確な一致」を選択し、次に「検索」をクリックしてください。	正確な一致は <b>Minelt</b> アプリケーションに表示されます：  <p>The screenshot displays the Minelt software interface. The main window shows a mass spectrum plot with the x-axis labeled 'm/z' ranging from 40 to 320 and the y-axis representing relative intensity from 0 to 1000. The base peak is at m/z 231. Other significant peaks are labeled at m/z 42, 51, 56, 69, 70, 77, 82, 91, 96, 105, 118, 132, 146, 158, 188, and 202. Below the plot is a table with columns for 'MS (GC)', 'I', 'Tag', 'ID', 'Name', 'Chemical Structure', and 'Spectrum'. The first entry is highlighted, showing a relative intensity of 100.00, MSX ID 22239, and the name 'Acetanilide, N-(1-phenethyl-4-piperidyl)'. To the right of the plot is a panel with the chemical structure and a table of properties:</p> <table border="1"><thead><tr><th>部分構造</th><th>選択部分構造</th><th>オリジナルデータファイル</th></tr><tr><th>全プロパティ</th><th>添付ファイル</th><th>選択したプロパティ</th></tr><tr><th>名称</th><th>名称</th><th>値</th></tr></thead><tbody><tr><td>名称</td><td>Acetanilide, N-(1-phenethyl-4-piperidyl)-</td><td></td></tr><tr><td>CAS Registry Number</td><td>3258-84-2</td><td></td></tr><tr><td>Comments</td><td>AI Predicted SSNP RI: 2751 AI RI Estimation Error: 22</td><td></td></tr><tr><td>Estimated Kovats Retention Index</td><td>2639 (Estimation Error: 83 at 50%; 356 at 95% Confidence Interval; Nitrogen-containing)</td><td></td></tr><tr><td>Exact Mass</td><td>322.204514 u</td><td></td></tr><tr><td>Formula</td><td>C<sub>21</sub>H<sub>26</sub>N<sub>2</sub>O</td><td></td></tr><tr><td>InChI</td><td>InChI=1S/C21H26N2O/c1-</td><td></td></tr></tbody></table>	部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ	名称	名称	値	名称	Acetanilide, N-(1-phenethyl-4-piperidyl)-		CAS Registry Number	3258-84-2		Comments	AI Predicted SSNP RI: 2751 AI RI Estimation Error: 22		Estimated Kovats Retention Index	2639 (Estimation Error: 83 at 50%; 356 at 95% Confidence Interval; Nitrogen-containing)		Exact Mass	322.204514 u		Formula	C <sub>21</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub> O		InChI	InChI=1S/C21H26N2O/c1-	
部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																														
全プロパティ	添付ファイル	選択したプロパティ																														
名称	名称	値																														
名称	Acetanilide, N-(1-phenethyl-4-piperidyl)-																															
CAS Registry Number	3258-84-2																															
Comments	AI Predicted SSNP RI: 2751 AI RI Estimation Error: 22																															
Estimated Kovats Retention Index	2639 (Estimation Error: 83 at 50%; 356 at 95% Confidence Interval; Nitrogen-containing)																															
Exact Mass	322.204514 u																															
Formula	C <sub>21</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub> O																															
InChI	InChI=1S/C21H26N2O/c1-																															



部分構造の検索を設定および実行

アクション	結果
<p>1 <b>SearchIt</b> に戻るには、「KnowItAllBack」 ボタンをクリックしてください。</p>  <p>もし「構造」タブにいない場合は、構造検索を再開するために…クリックしてください。</p>	<p>「構造の検索」 ダイアログが表示されます。</p> 
<p>2 部分構造の検索を選択し、それから「検索」をクリックしてください。検索結果に向かってレコードをクリックしてください。</p> <p><b>注記：</b> 検索構造と完全に一致するものだけでなく、部分構造検索はデータベースの構造の一部としてクエリー構造を含むレコードを返します。</p>	<p>部分構造検索では、正確な一致検索よりも多くの結果が得られます。部分構造は青色でハイライト表示され、追加のフラグメントは黒色で表示されます。</p>  <p>なお、元のヒットリストはまだ利用可能であり、該当するタブ（左下隅）をクリックすることでアクセスできます。</p>

類似検索を設定して実行

アクション	結果
<p>1 <b>SearchIt</b> に戻るには、「KnowItAllBack」ボタンをクリックしてください。</p> 	<p><b>SearchItStructure</b> 検索ダイアログが表示されます：</p> 
<p>2 「類似検索」のラジオボタンをクリックしてください。スコアリング方法はデフォルトの <b>Tanimoto</b> を使用します。</p>	<p>検索モードには <b>Tanimoto</b> が選択されています：</p> 
<p>3 「Search」をクリックします。</p>	<p>検索構造と類似した構造が <b>Minelt</b> アプリケーションに表示されます：</p> 

# 検索

## 全ての化合物と純粋な化合物のデータベース選択

### 目的

この演習では、全ての化合物と純粋な化合物のデータベース選択の使用方法を説明します。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- 全ての化合物と純粋な化合物のデータベース選択を使用する方法
- 検索結果の解釈方法

### 背景

全ての化合物と純粋な化合物のデータベース選択は、構造、名前、InChI、CAS 登録番号、または同義語によってデータを関連付けています。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\IR  
フォルダに移動します。

- Acetonitrile.jdx

#### **KnowItAll** 使用アプリケーション

- SearchIt™
- Minelt™

全ての化合物の検索を設定して実行

	アクション	結果
1	<p>以下の手順を実行してください：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが開いていない場合は、データツールボックスに移動し、そのアイコンをクリックします。</li> </ul>  <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが既にある場合は、現在の検索を終了するために「<b>SearchIt Close</b> (SearchIt の終了)」ボタンをクリックしてください。</li> </ul>	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションの「<b>ユーザー選択</b>」タブが表示され最後に使用したデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに表示されます：</p> 
2	<p>「<b>検索カテゴリー</b>」の下にある「<b>スペクトル</b>」をクリックします。C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\ Samples\IR に移動し、<b>acetonitrile.jdx</b> を選択します。</p>	<p>アセトニトリルのスペクトルが表示されます：</p> 
3	<p>「<b>検索データベース</b>」の下にある「<b>全ての化合物</b>」オプションを選択します。</p>	<p>「<b>全ての化合物</b>」の検索オプションが選択されます。</p>

	アクション	結果
4	「Search」をクリックします。	<p>検索が実行され、結果が <b>Minelt</b> アプリケーションに表示されます：</p>  <p>ユーザー選択データベース検索と比較すると、ヒットに関連する追加情報が表示されます：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 左上のペインには複製が表示されますが、この検索には参加せず、それら进行操作しても HQI (ヒット品質指数) の値は変わりません。太字の ID はヒットスペクトルを示しています。</li> <li>• ヒットした化合物に関する他のスペクトル情報は、スペクトルペインの下にあるタブで表示されます。</li> </ul>
5	ヒント:	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>ユーザー選択 (User-Select)</b> : ユーザーが検索するデータベースを選択します。ここでは、ユーザーデータベースを検索に含めることができます。</li> <li>• <b>全ての化合物</b> : 全てのライセンスされた参考データベースが含まれています。レコードは構造、名前、InChI、CAS 登録番号、または類義語によって関連付けられています。</li> <li>• <b>純粋な化合物</b> : 商業的な化合物を除いた化合物が含まれています。</li> </ul>

# 検索

## マルチテクニックスペクトル検索の方法

### 目的

この演習では、KnowItAll 情報システムを使用してマルチテクニックスペクトル検索を行う方法を示します。

### 目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- ▶ マルチテクニックスペクトル検索の設定方法
- ▶ マルチテクニックスペクトル検索の結果を分析する方法

### 背景

マルチテクニックスペクトル検索は、複数の分析技術に基づいた化学的な類似性を最適化し、不明な化合物に関する化学的な知識を最大限に引き出すことができます。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

「C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Simultaneous Multi-Technique Searching」フォルダー

- Unknown D IR.jdx
- Unknown D Raman.jdx

#### KnowItAll 使用アプリケーション

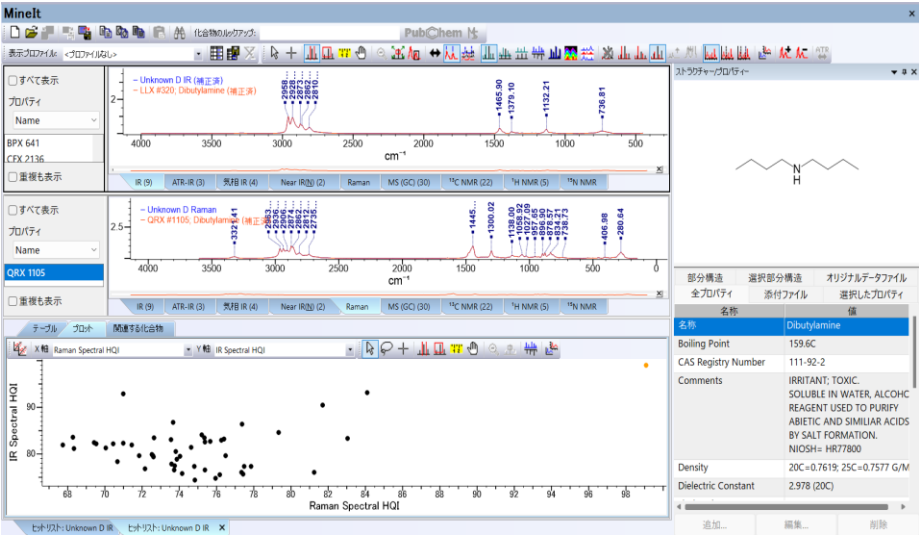
- SearchIt™
- Minelt™

## 「ユーザー選択検索データベース」オプションを使用して、マルチテクニックスペクトル検索を設定して実行



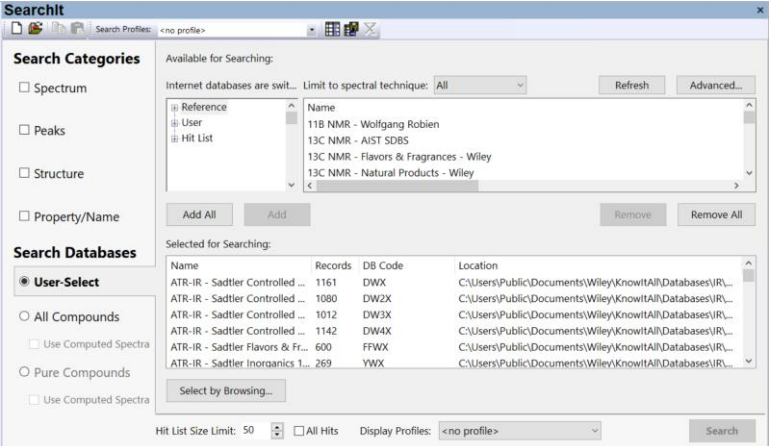
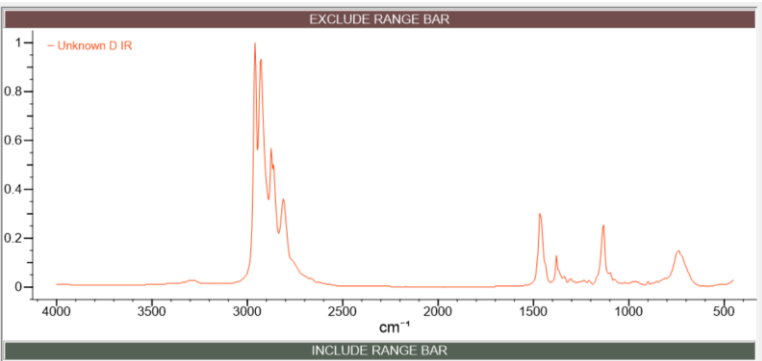
	アクション	結果
1	<p>以下の手順を実行してください：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが開いていない場合は、データツールボックスに移動し、そのアイコンをクリックします。</li> </ul>  <p>SearchIt</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが既にある場合は、現在の検索を終了するために「<b>SearchIt Close (SearchIt の終了)</b>」ボタン  をクリックしてください。</li> </ul>	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションの「<b>ユーザー選択</b>」タブが表示され、最後に使用したデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに表示されます：</p> 
2	<p>検索データベースオプションの中から「<b>ユーザー選択</b>」を選択してください。もし既に検索用に選択されているデータベースがあれば、選択をクリアするために「<b>すべて削除</b>」をクリックして選択を解除してください。</p>	<p>「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」のデータベースセクションがクリアされます：</p> 
3	<p>「<b>スペクトル技術に制限</b>」タブを選んで、<b>IR</b> を選択してから「<b>すべて追加</b>」をクリックしてください。次に <b>Raman</b> を選択してからも同様に「<b>すべて追加</b>」をクリックしてください。</p>	<p>利用可能なすべての <b>IR</b> および <b>Raman</b> のデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」ウィンドウに追加されます。</p> 

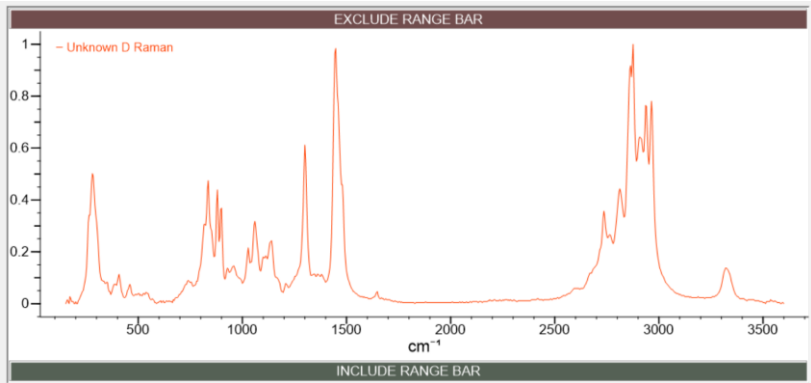
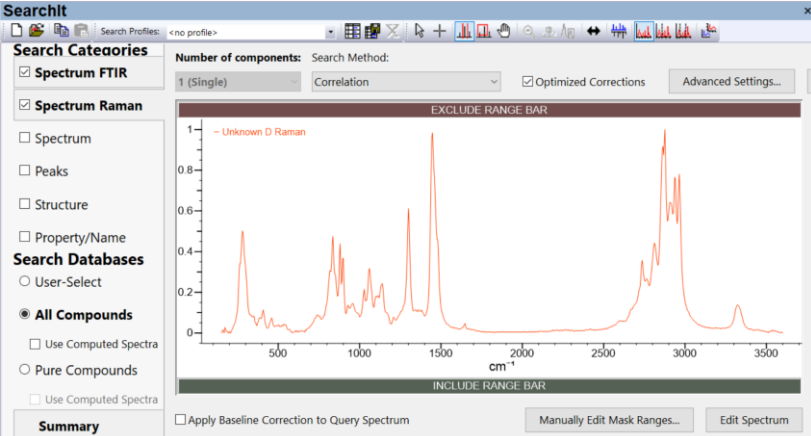
	アクション	結果
4	<p>「<b>検索カテゴリ</b>」の下にある「<b>スペクトル</b>」をクリックします。</p> <p>「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Simultaneous Multi-Technique Searching」に移動してください。</p> <p>「<b>Unknown D IR.idx</b>」を開いてください。</p>	<p>IR スペクトルが「<b>SearchIt スペクトル</b>」ウィンドウに表示されます：</p> 
5	<p>さらにスペクトルを追加するために、「<b>検索カテゴリ</b>」の下にある「<b>スペクトル</b>」をクリックしてください：</p> <p>「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Simultaneous Multi-Technique Searching」フォルダから、<b>Unknown D Raman.idx</b> を選択してください。</p>	<p>Raman スペクトルが検索に追加されます。</p> 

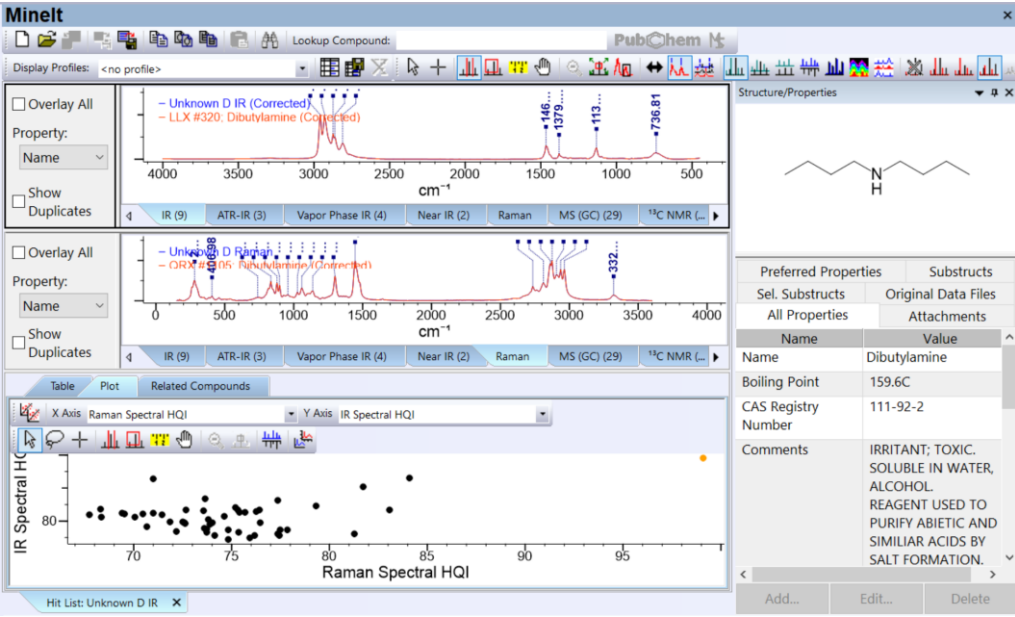


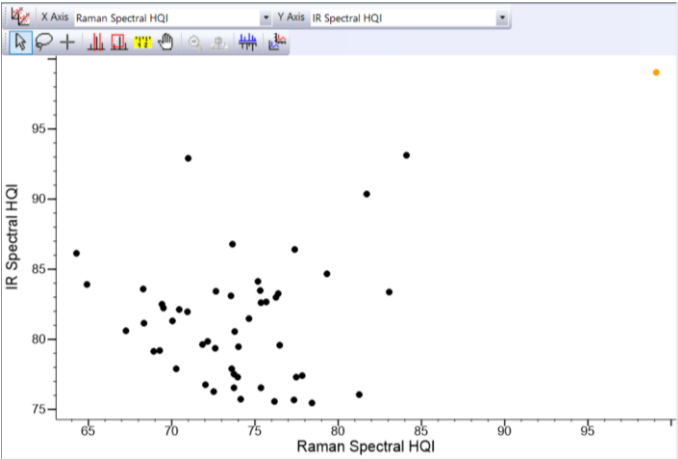
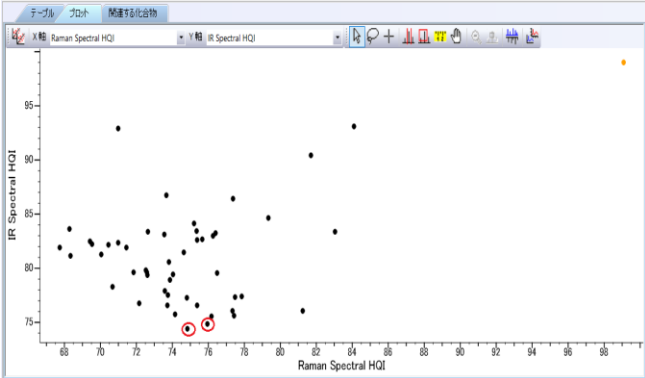
	アクション	結果														
6	「Search」をクリックします。	<p>検索結果は <b>Minelt</b> アプリケーションで表示されます：</p>  <p>マルチテクニック検索のため、データベース内のプロットタブには、2つのスペクトル技術のHQI値を表す散布図が自動的に表示されます。右上の最も高いHQI値を持つ点を選択されます。プロット内の点をクリックして異なる検索結果を表示したり、<b>テーブルタブ</b>をクリックして表形式の結果を表示したりすることができます。</p> <table border="1" data-bbox="1365 706 1606 925"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>値</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>名称</td> <td>Diethylamine</td> </tr> <tr> <td>Boiling Point</td> <td>159.6C</td> </tr> <tr> <td>CAS Registry Number</td> <td>111-92-2</td> </tr> <tr> <td>Comments</td> <td>IRRITANT; TOXIC. SOLUBLE IN WATER, ALCOHOL REAGENT USED TO PURIFY ABIETIC AND SIMILAR ACIDS BY SALT FORMATION. NIOSH= HR:77800</td> </tr> <tr> <td>Density</td> <td>20C=0.7619; 25C=0.7577 G/M</td> </tr> <tr> <td>Dielectric Constant</td> <td>2.978 (20C)</td> </tr> </tbody> </table>	名称	値	名称	Diethylamine	Boiling Point	159.6C	CAS Registry Number	111-92-2	Comments	IRRITANT; TOXIC. SOLUBLE IN WATER, ALCOHOL REAGENT USED TO PURIFY ABIETIC AND SIMILAR ACIDS BY SALT FORMATION. NIOSH= HR:77800	Density	20C=0.7619; 25C=0.7577 G/M	Dielectric Constant	2.978 (20C)
名称	値															
名称	Diethylamine															
Boiling Point	159.6C															
CAS Registry Number	111-92-2															
Comments	IRRITANT; TOXIC. SOLUBLE IN WATER, ALCOHOL REAGENT USED TO PURIFY ABIETIC AND SIMILAR ACIDS BY SALT FORMATION. NIOSH= HR:77800															
Density	20C=0.7619; 25C=0.7577 G/M															
Dielectric Constant	2.978 (20C)															

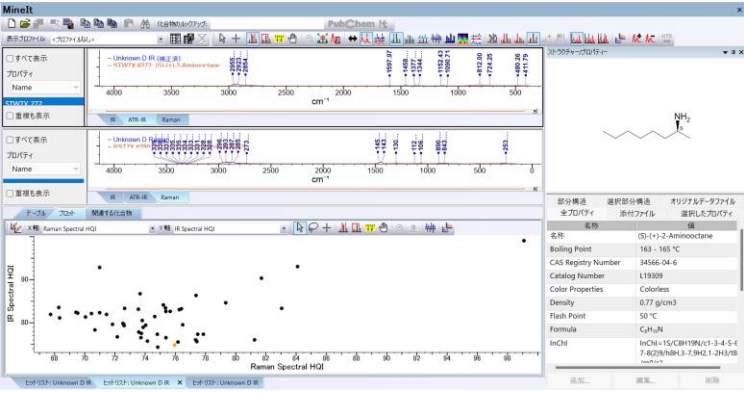
「全ての化合物検索データベース」オプションを使用して、マルチテクニックのスペクトル検索を設定

	アクション	結果
1	<p>以下の手順を実行してください：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが開いていない場合は、データツールボックスに移動し、そのアイコンをクリックします。</li> </ul>  <p>もし <b>SearchIt</b> アプリケーションが既に開いている場合は、現在の検索を終了するために「<b>SearchIt Close (SearchIt の終了)</b>」ボタン  をクリックしてください。</p>	<p><b>SearchIt</b> アプリケーションの「<b>ユーザー選択</b>」タブが表示され、最後に使用したデータベースが「<b>Selected for Searching (検索対象として選択された)</b>」リストに表示されます：</p> 
2	<p>「<b>検索カテゴリー</b>」の下にある「<b>スペクトル</b>」をクリックします。「<b>C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Simultaneous Multi-Technique Searching</b>」に移動し、<b>Unknown D IR.jdx</b> を選択してください。</p>	<p>スペクトルが <b>SearchIt</b> アプリケーションに表示されます。</p> 

	アクション	結果
3	<p>さらにスペクトルを追加するために、「<b>検索カテゴリー</b>」の下にある「<b>スペクトル</b>」をクリックしてください：</p> <p>「C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Simultaneous Multi-Technique Searching」フォルダから、<b>Unknown D Raman.jdx</b> を選択してください。</p>	<p>Raman スペクトルが検索に追加されます。</p> 
4	<p>「<b>検索データベース</b>」オプションの中で「<b>全ての化合物</b>」を選択してください。</p>	<p>「<b>検索データベース</b>」では、「<b>全ての化合物</b>」検索が選択された状態になります。</p> 

	アクション	結果
5	「Search」をクリックします。	<p>検索結果は <b>Minelt</b> アプリケーションで表示されます：</p>  <p>マルチテクニックの検索ですので、データベース内のプロットタブでは、2つのスペクトル技術のHQI値を表す散布図が自動的に表示されます。最もHQI値が高い点が右上に選択されます。</p>

	アクション	結果
6	結果の例を見てみましょう。まず、 <b>ユーザー選択データベース検索</b> と <b>全ての化合物データベース検索</b> の散布図を比較します。	<p data-bbox="709 326 1062 354">ユーザー選択データベース検索：</p>  <p data-bbox="709 829 1045 857">全ての化合物データベース検索</p>  <p data-bbox="709 1252 1577 1279">丸で囲まれた領域やその内部にある点の周辺に、より多くの点が存在しています。</p>

アクション	結果
<p>7 ステップ 5 の検索結果を使用して、丸で囲まれた点を詳しく調べましょう。</p>	<p>これらの 2 つのレコードは、IR スペクトルと Raman スペクトルの記録が、構造ではなくレコード内の他の特徴（名前、InChI、CAS 登録番号、または類義語）によって関連付けられている立体異性体です。</p> <p><b>(S)イソマー：</b></p>  <p><b>(R)イソマー：</b></p> 